

SÉRIE A, N° 4099

N° D'ORDRE : 4950

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Albert SALMONA

1^{re} THÈSE. — « Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre ».

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le 14 Juin 1963 devant la Commission d'examen

MM. L. DE BROGLIE	<i>Président.</i>
DAUDEL	{ <i>Examineurs.</i>
ARNOUS	
KAHAN	
	<i>(Invité).</i>

Éditions de la Revue d'Optique théorique et instrumentale

3 et 5, boulevard Pasteur — 165, rue de Sèvres

PARIS (15^e)

1964



Digitized by the Internet Archive
in 2026

FACULTÉ DES SCIENCES DE PARIS

Nom du Candidat : SALMONA

Prénom : Albert

Date de la soutenance : 14 Juin 1963

Numéro d'ordre : Série A, 4099, N° 4950

1

SALMONA (Albert). — Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre. — *Paris*, Editions de la Revue d'Optique, 1964, 35 p., 6 fig.

Th. Sc. Phys. Paris, 1964, Série A, 4099, N° 4950.

2

SALMONA (Albert). — Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre. — *Paris*, Editions de la Revue d'Optique, 1964, 35 p., 6 fig.

Th. Sc. Phys. Paris, 1964, Série A, 4099, N° 4950.

3

SALMONA (Albert). — Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre. — *Paris*, Editions de la Revue d'Optique, 1964, 35 p., 6 fig.

Th. Sc. Phys. Paris, 1964, Série A, 4099, N° 4950.

4

SALMONA (Albert). — Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre. — *Paris*, Editions de la Revue d'Optique, 1964, 35 p., 6 fig.

Th. Sc. Phys. Paris, 1964, Série A, 4099, N° 4950.

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Albert SALMONA

1^{re} THÈSE. — « Calcul des sections de choc de la diffusion d'électrons de faibles énergies par des atomes de sodium neutre ».

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le 14 Juin 1963 devant la Commission d'examen

MM. L. DE BROGLIE	<i>Président.</i>
DAUDEL	{ <i>Examineurs.</i>
ARNOUS	
KAHAN	<i>(Invité).</i>

Éditions de la *Revue d'Optique théorique et instrumentale*

3 et 5, boulevard Pasteur — 165, rue de Sèvres

PARIS (15^e)

1964



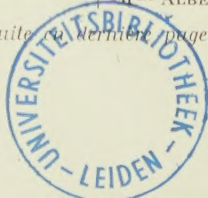
FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

PROFESSEURS

Doyen M. ZAMANSKY

G. JULIA	T	Analyse supérieure et Algèbre supérieure.	ULRICH	T	Physiologie végétale.
PRENANT	T	Anatomie et Histologie comparée.	MARECHAL	T	Optique théor. et appliq.
GRASSÉ	T	Evolution des êtres organisés.	KIRRMANN	T	Théories Chimiques.
PRÉVOST	T	Chimie organique.	CHADEFAUD	T	Botanique.
WYART	T	Minéralogie et Cristallog.	M ^{lle} LE BRETON	T	Physio. de la nutrition.
TEISSIER	T	Zoologie.	LELONG	T	Application de l'analyse à la géométrie.
MANGENOT	T	Biologie Vég. (Orsay).	DEVILLERS	T	Anatomie et Histol. Comp.
AUGER	T	Physique quantique et Relativité.	EHRESMANN	T	Topologie Algébrique.
MONNIER	T	Physiologie Générale.	FRANÇON	T	Physique (S. P. C. N.).
PIVETEAU	T	Paléontologie.	GLANGEAUD	T	Géographie Phys. et Géol. dynamique.
ROCARD	T	Physique (E. N. S.).	GODEMENT	T	Mathématiques (M. P. C.).
CARTAN	T	Mathématiques (E. N. S.).	PISOT	T	Tech. Mathém. de la Phys.
LAFFITTE	T	Chimie générale.	ROCH	T	Géologie.
FAVARD	T	Géométrie supérieure.	SCHATZMAN	T	Astrophysique.
COULOMB	T	Physique du Globe.	TERMIER	T	Paléontologie stratig.
M ^{lle} COUSIN	T	Biologie Animale (S. P. C. N.).	ZAMANSKY	T	Mathématiques générales.
CHRETIEN	T	Chimie minérale.	LENNUIER	T	Physique (M. G. P.).
DRACH	T	Zoologie.	RIZET	T	Génétique.
KASTLER	T	Physique (E. N. S.).	ROUTHIER	T	Géologie appliquée.
EPHROSSI	T	Génétique.	M ^{me} TONNELAT	T	Physique théorique.
RIVIÈRE	T	Géologie S. P. C. N. et Sédim.	DIXMIER	T	Mathématiques (M. P. C.).
GAUTHIER	T	Biologie Vég. (P. C. B.).	SOUCHAY	T	Chimie générale.
LUCAS R.	T	Recherches Physiques.	AIGRAIN	T	Electrotechnique gén.
THOMAS A.	T	Biologie cellulaire.	BRUSSET	T	Chimie systématique.
ARNULF	T	Optique appliquée.	M. LEVY	T	Physique théorique des hautes énergies (Orsay).
MORAND	T	Physique Enseignement.	M ^{me} CHAIX	T	Chimie biologique.
SOLEILLET	T	Physique (P. C. B.).	M ^{me} HUREL-PY	T	Biologie végétale (P. C. B.).
FORTIER	T	Mécanique Exp. des Fluides.	PIAUX	T	Chimie (M. P. C.).
DANJON	T	Astronomie.	BRUN	T	Mécanique théorique des Fluides.
PETIT	T	Biologie maritime.	LEDERER	T	Chimie biologique.
QUENEY	T	Météorologie et dynamique atmosphérique.	M ^{me} DUBREIL	T	Mathématique (Agrég.).
GALLIEN	T	Embryologie.	M ^{me} LE LONG	T	Mathématiques II (E. N. S.).
EICHORN	T	Botanique.	BELLAI	T	Géologie (S. P. C. N.).
DE CUGNAC	T	Biologie Vég. (S. P. C. N.).	COTTE	T	Physique électricité.
M ^{lle} CAUCHOIS	T	Chimie Physique.	DUBOIS J. E.	T	Chimie organique.
THELLIER	T	Physique du Globe.	LAMOTTE	T	Zoologie (E. N. S.).
L'HÉRITIER	T	Biologie Gén. (Orsay).	MICHEL A.	T	Chimie minérale (Orsay).
GRIVET	T	Radioélectricité (Orsay).	OLMER	T	Energétique générale.
PONCIN	T	Mécanique Générale.	ROUAULT	T	Electricité (Orsay).
DUBREIL	T	Arithm. et Théorie des Nombres.	GAUTHIER	T	Mécanique appliquée.
QUELET	T	Chimie Organique.	BARCHIEWITZ	T	Chimie Physique.
CAGNIARD	T	Géophysique appliquée.	BROSSEL	T	Physique atomique.
CHAMPETIER	T	Chimie macromoléculaire.	BUSER	T	Physiologie comparée.
CUVILLIER	T	Micropaléontologie.	CAMUS	T	Physiol. Végétale BMPV.
JUNG	T	Pétrographie.	CASTAING	T	Physique II Thermod. Orsay.
TRILLAT	T	Microscopie et diffraction électronique.	CURIEN	T	Minéralo. et Cristallog.
WIEMANN	T	Chimie organique et struc.	MOYSE	T	Physiologie végét. Orsay.
JACQUINOT	T	Spectroscopie et Physique céleste (Orsay).	NOIROT	T	Evolution des Etres Org.
VASSY	T	Physique de l'atmosphère.	PANNETIER	T	Chimie générale.
DESTOUCHES	T	Théories Physiques.	POSSOMPES	T	Zoologie.
AMIEL	T	Chimie générale.	PULLMANN	T	Chimie quantique.
HOGART	T	Minéralogie et Cristallog.	TEILLAC	T	Physique Nucl. et Radioactivité.
J. P. MATHIEU	T	Physique Optique.	TONNELAT	T	Biologie Physicochim.
COUTEAUX	T	Cytologie.	VILLE	T	Econométrie.
MAY	T	Zoologie (Orsay).	WILLEMART	T	Chimie (P. C. B.).
CHOUQUET	T	Théorie des fonctions et Topologie.	DODE	T	Chimie (Orsay).
FELDMANN	T	Biologie Végét. marine.	FREYMAN	T	Recherches Physiques.
GUINIER	T	Physique des Solides (Orsay).	GUINCHET	T	Biol. vég. S. P. C. N. (Orsay).
JOST	T	Physiologie comparée.	ROLLET	T	Chimie minérale.
FORTET	T	Calcul des Probabilités et Physique mathématique.	M ^{lle} JOSIEN	T	Chimie S. P. C. N.
SCHARTZ	T	Calcul diff. et Intégral.	CHEVALLEY	T	Géométrie algéb. et théorie des groupes.
CHOUARD	T	Physiologie végétale.	ARNOULT	T	Electronique (Orsay).
MALAVARD	T	Aviation (Techn. Aéronaut.).	CHAPELLE	T	Physique (Orsay).
BRELOT	T	Calcul diff. et Intégral.	DELANGE	T	Mathématiques I (Orsay).
NORMANT	T	Chimie organique.	DENY	T	Mathématiques Gén. Orsay.
BENARD	T	Chimie Minérale.	GERMAIN	T	Mécanique théor. des fluides.
BUVAT	T	Botanique (E. N. S.).	LUCAS G.	T	Géologie.
DUGUE	T	Statistiques Mathématiques.	ALLARD	T	Chimie Physique.
SOULAIRAC	T	Psychophysiologie.	BERTHELOT	T	Phys. des particules Fond.
			BRICART	T	Météor. et Phys. de l'Atmosphère.
			M ^{me} ALBE-FESSARD	T	Psychophysiologie.

(suite sur dernière page)



CALCUL DES SECTIONS DE CHOC DE LA DIFFUSION D'ÉLECTRONS DE FAIBLES ÉNERGIES PAR DES ATOMES DE SODIUM NEUTRES

PAR

Albert SALMONA

INTRODUCTION

Ce travail est consacré à l'étude de la diffusion d'électrons par des atomes de sodium neutres initialement dans l'état fondamental.

La première partie, après un bref rappel de la théorie des collisions atomiques par la méthode des ondes partielles et des techniques variationnelles utilisées en physique atomique, donne la dérivation des équations intégral-différentielles de choc.

La seconde partie est consacrée à la résolution de ces équations, d'abord au moyen de différentes approximations puis d'une façon exacte pour des électrons ayant une énergie nulle. Les résultats trouvés paraissent être confirmés par des expériences récentes.

La troisième partie est consacrée à la résolution du système d'équations différentielles, les termes intégraux ayant été négligés, décrivant la collision au voisinage supérieur de l'énergie d'excitation du premier état excité du sodium et à la comparaison des résultats obtenus à l'approximation de Born. Les résultats trouvés sont dans ce cas trop petits pour les sections élastiques et trop grands pour les sections inélastiques.

Je tiens à remercier ici M^r T. Kahan, Maître de recherches au Centre National de la Recherche Scientifique, sans lequel je n'aurais pu entreprendre ces recherches et M^r Arnous, Maître de conférence à la Sorbonne, de l'intérêt qu'ils m'ont porté tout au long de l'exécution de ces travaux.

Je tiens aussi à remercier de nombreuses personnes qui m'ont prêté leur concours actif de façons diverses et notamment M^r Arsac et M^r van Regemorter (Observatoire de Meudon), les D^{rs} A. Burgess, T. John, I. Percival (Univ. College) et tout particulièrement le D^r M. Seaton (Univ. College) dont la compétence et la vigilance continuelle m'ont été d'une aide irremplaçable.

I. Formulation du problème de choc électron-atome de sodium neutre

1. Notations. — Nous utiliserons le système d'unités atomiques de Hartree dans lequel la charge et la masse de l'électron, la vitesse de la lumière et la cons-

tante $\hbar$ de Planck sont égales à l'unité : $e = m = c = \hbar = 1$. Dans ce système, le rayon a_0 de l'atome d'hydrogène est égal à 1, l'unité de longueur vaut donc $0,529 \times 10^{-8}$ cm. L'unité d'énergie est égale au double de l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, soit 27,2 eV.

Considérons un atome. Nous désignerons la charge électrique de son noyau par Z et le nombre de ses électrons par N . A chaque électron de l'atome sera affecté un indice i variant de 1 à N . Dans le problème de choc nous considérerons en outre un électron supplémentaire affecté de l'indice $i = N + 1$.

Pour les variables nous utiliserons les notations suivantes : $\vec{r}_i$ est un vecteur, qui repère la position du i^{me} électron par rapport au noyau, dont la longueur est r_i et dont les coordonnées angulaires θ_i, φ_i seront désignées par $\hat{r}_i$. $\vec{\sigma}_i$ désignera le spin du i^{me} électron et $\vec{x}_i$ désignera alors l'ensemble des coordonnées $(\vec{r}_i, \vec{\sigma}_i)$. Enfin, le symbole $r^{(i)}$ signifiera que l'on considère l'ensemble de toutes les coordonnées définissant le système atome-électron à l'exception de la coordonnée r_i ; le symbole $\vec{x}^{(i)}$ aura une signification identique si on remplace r_i par $\vec{x}_i$. Nous poserons en outre $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$.

Pour les nombres quantiques définissant le système, nous utiliserons les notations suivantes : pour définir un état α de l'atome nous utiliserons les nombres quantiques a, L, S, M_L, M_S et nous écrirons $\alpha = a, L, S, M_L, M_S$; L, M_L se rapportent au moment orbital de l'atome et à sa projection sur un axe; S, M_S se rapportent au spin de l'atome et à sa projection; a désigne un ensemble supplémentaire de nombres quantiques permettant de caractériser complètement l'état α de l'atome; l, m_l désignent le moment orbital et sa projection pour l'électron supplémentaire; $s = 1/2, m_s$ désignent les quantités analogues relatives au spin. Enfin L^T, M_L^T se rapportent au moment orbital total du système, S^T, M_S^T au spin total.

Le système atome-électron pourra être décrit dans deux représentations différentes, soit dans la base $\gamma = a, L, l, S, 1/2, m_l, m_s, M_L, M_S$, soit dans la base $\Gamma = a, L^T, L, l, S^T, S, 1/2, M_L^T, M_S^T$.

Enfin, si le système possédant une énergie totale E est tel que l'atome soit dans un état propre α d'énergie E_α , l'électron supplémentaire aura alors pour énergie $\frac{1}{2} k_\alpha^2 = E - E_\alpha$.

Précisons pour terminer que l'hamiltonien de p électrons $H(p)$ sera toujours supposé sans couplage de spin-orbite :

$$H(p) = \sum_{i=1}^p \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + \sum_{j=1+1}^p \frac{1}{r_{ij}} \right], \quad H_i(1) = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i}.$$

2. Formulation des problèmes de choc (atomes neutres). Matrices R et S . —

Nous allons donner un bref résumé de la formulation des problèmes de choc pour le cas des atomes neutres telle qu'elle apparaît dans [1] et dans [2].

Supposons initialement l'atome dans l'état α' et l'électron, infiniment éloigné, doué d'une énergie $\frac{1}{2} k_{\alpha'}^2$ et d'un moment angulaire l' .

La fonction d'onde du système est alors

$$\Phi_{\gamma'} = \psi_{\gamma'}(r^{(N+1)}) \frac{1}{k_{\alpha'}^{1/2} r_{N+1}} \sin \left(k_{\alpha'} r_{N+1} - l' \frac{\pi}{2} \right),$$

en posant $\psi_{\gamma'}(r^{(N+1)}) = \psi_{\alpha'}(\vec{x}^{(N+1)}) Y_{l'm_l}(\hat{r}_{N+1}) \delta(\vec{x}_{N+1}, m_s')$, où $\psi(\vec{x}^{(N+1)})$ désigne la fonction d'onde de l'atome dans l'état α' .

Autrement dit si $\Psi(\gamma' | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N+1})$ désigne la fonction d'onde exacte, avant que l'interaction ait lieu $\Psi(\gamma') = \Phi_{\gamma'}$. Après la collision, la fonction d'onde peut être développée suivant les fonctions propres de l'atome

$\Psi(\gamma') = \sum_{\gamma} \psi_{\gamma}(r^{(N+1)}) \frac{1}{r_{N+1}} F_{\gamma}(\gamma' | r_{N+1})$ et on aura comme forme asymptotique

$$(1) \quad F_{\gamma}(\gamma' | r_{N+1}) \sim k_{\gamma}^{-1/2} \left[\sin \left(k_{\gamma} r_{N+1} - l_{\gamma} \frac{\pi}{2} \right) \delta_{\gamma\gamma'} + \cos \left(k_{\gamma} r_{N+1} - l_{\gamma} \frac{\pi}{2} \right) R_{\gamma\gamma'} \right]$$

$$\text{si } k_{\gamma}^2 > 0, \quad F_{\gamma}(\gamma' | r_{N+1}) \sim 0 \quad \text{si } k_{\gamma}^2 < 0.$$

Une légère modification est à faire pour tenir compte de l'indiscernabilité des électrons. La fonction d'onde doit être complètement antisymétrisée. La fonction d'onde de l'atome étant déjà complètement antisymétrique pour les N variables $\vec{x}_i$, il suffit d'écrire pour $\Psi(\gamma')$ le développement

$$(2) \quad \Psi(\gamma') = \Psi(\gamma' | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N+1}) = \mathcal{A} \sum_{\gamma} \psi_{\gamma}(r^{(i)}) \frac{1}{r_i} F_{\gamma}(\gamma' | r_i),$$

où $\mathcal{A}$ est l'opérateur d'antisymétrisation,

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{i=1}^{N+1} (-1)^{N+1-i} P_{i,N+1}$$

et où $P_{i,N+1}$ désigne la permutation des indices i et $N+1$.

La matrice R ainsi définie est la matrice de réactance; elle définit la déformation due à la collision par rapport à une onde plane décomposée en ondes partielles. $R \equiv 0$ s'il n'y a pas d'interaction. Il est préférable d'utiliser la représentation Γ au lieu de la représentation γ , car dans cette représentation L_Z^T commute avec $H(N+1)$. On passe de l'une à l'autre de ces représentations au moyen de la transformation unitaire

$$(3) \quad \langle \gamma | \gamma' \rangle = \delta(\alpha, \alpha') \delta(L, L') \delta(l, l') \delta(S, S') \langle L | L^T M_L^T | L | M_L m_l \rangle \times$$

$$\times \langle S \frac{1}{2} S^T M_S^T | S \frac{1}{2} M_S m_s \rangle,$$

les coefficients $\langle j_1 j_2 J M_J | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$ désignant les coefficients de Clebsch-Gordan. Remarquons que $\langle \gamma | \gamma' \rangle = \langle \gamma' | \gamma \rangle$.

Par suite, si on pose $\psi_{\Gamma}(r^{(i)}) = \sum_{\gamma} (\Gamma | \gamma) \psi_{\gamma}$, on aura

$$(4) \quad \Psi(\Gamma') = \Psi(\Gamma' | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N+1}) = \mathcal{A} \psi_{\Gamma}(r^{(i)}) \frac{1}{r_i} F_{\Gamma}(\Gamma' | r_i),$$

avec

$$F_{\Gamma}(\Gamma' | r) \sim k_{\Gamma}^{-1/2} \left[\sin \left(k_{\Gamma} r - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) \delta_{\Gamma\Gamma'} + \cos \left(k_{\Gamma} r - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) R_{\Gamma\Gamma'} \right] (k_{\Gamma}^2 > 0),$$

$$F_{\Gamma}(\Gamma' | r) \sim 0 \quad (k_{\Gamma}^2 < 0).$$

On peut, au lieu d'utiliser des formes asymptotiques en sinus et cosinus, utiliser l'exponentielle rentrante $\exp \left[-i \left(k_{\Gamma} r - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) \right]$ et l'exponentielle sortante

$\exp \left[+ i \left(k_{\Gamma} r - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) \right]$ affectée d'un coefficient $S_{\Gamma\Gamma'}$. On définit ainsi une matrice $\mathbf{S}$ (matrice de diffusion) égale à l'unité s'il n'y a pas d'interaction.

On peut alors démontrer les résultats suivants :

1° si l'hamiltonien est invariant par rotation, $\mathbf{R}$ ou $\mathbf{S}$ ne dépendent pas des nombres quantiques M_L^T ; $\mathbf{R}$ et $\mathbf{S}$ sont indépendants de M_S^T si l'hamiltonien ne dépend pas des spins; $R_{\Gamma\Gamma'}$ et $S_{\Gamma\Gamma'}$ sont alors des fonctions de $a, S, L, l, a', S', L', l'$ seulement et se décomposent en matrices à échelons, chaque échelon étant déterminé par une valeur bien déterminée de S^T et de L^T ;

2° entre $\mathbf{R}$ et $\mathbf{S}$, on a les relations $\mathbf{S} = (1 + i\mathbf{R})/(1 - i\mathbf{R})$, $\mathbf{R} = i(1 - \mathbf{S})/(1 + \mathbf{S})$;

3° $\mathbf{R}$ est une matrice réelle et symétrique d'où il en résulte que $\mathbf{S}$ est une matrice unitaire : $\mathbf{S}\mathbf{S}^+ = \mathbf{1}$.

La connaissance de la matrice $\mathbf{R}$ ou $\mathbf{S}$ fournit tous les renseignements sur les sections de choc; on définit, en général, la matrice de transition $\mathbf{T}$, $\mathbf{T} = \mathbf{1} - \mathbf{S}$. La section de choc qui fait passer l'atome de l'état $\alpha_1 = a_1, L_1, S_1$ à l'état $\alpha_2 = a_2, L_2, S_2$ est alors

$$(5) \quad Q(a_1, L_1, S_1 \rightarrow a_2, L_2, S_2) = \frac{\pi}{2(2S_1 + 1)(2L_1 + 1)k_{\alpha_1}^2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} T_{\Gamma\Gamma'}^T M_L^T M_S^T |T_{\Gamma\Gamma'}|^2.$$

3. Formulation des problèmes de chocs. Méthodes variationnelles. — Nous supposons toujours dans ce qui va suivre que les fonctions atomiques ψ_{Γ} sont exactes; les variations de fonctions portent uniquement sur les fonctions radiales $F_{\Gamma}(\Gamma')$; par suite, si on a

$$\Psi(\Gamma') \sim \sum_{r_i \rightarrow \infty} \psi_{\Gamma}(r_i) \frac{1}{r_i} k_{\Gamma}^{-1/2} \left[\delta_{\Gamma\Gamma'} \sin \left(k_{\Gamma} r_i - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) + R_{\Gamma\Gamma'} \cos \left(k_{\Gamma} r_i - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) \right],$$

la fonction variée sera asymptotiquement

$$\begin{aligned} \Psi(\Gamma') + \Delta\Psi(\Gamma') \sim \sum_{r_i \rightarrow \infty} \psi_{\Gamma} \frac{1}{r_i} k_{\Gamma}^{-1/2} \left[\delta_{\Gamma\Gamma'} \sin \left(k_{\Gamma} r_i - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) + \right. \\ \left. + (R_{\Gamma\Gamma'} + \Delta R_{\Gamma\Gamma'}) \cos \left(k_{\Gamma} r_i - l_{\Gamma} \frac{\pi}{2} \right) \right], \end{aligned}$$

c'est-à-dire $\Delta F_{\Gamma}(\Gamma') \sim k_{\Gamma}^{-1/2} \Delta R_{\Gamma\Gamma'} \cos[k_{\Gamma} r_i - l_{\Gamma}(\pi/2)]$.

Posons alors $K(\Phi, \Psi) = \langle \Phi, (H - E)\Psi \rangle - \langle (H - E)\Phi, \Psi \rangle$, on peut vérifier que l'on a

$$(6) \quad K[\Psi(\Gamma_1), \Delta\Psi(\Gamma_2)] = \frac{1}{2} \Delta R_{\Gamma_1\Gamma_2}.$$

Il en résulte que

$$\begin{aligned} (7) \quad \Delta \left[\langle \Psi(\Gamma_1), (H - E)\Psi(\Gamma_2) \rangle - \frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2} \right] = \langle \Delta\Psi(\Gamma_1), (H - E)\Psi(\Gamma_2) \rangle + \\ + \langle (H - E)\Psi(\Gamma_1), \Delta\Psi(\Gamma_2) \rangle + O(\Delta\Psi^2). \end{aligned}$$

Il s'ensuit que si cette variation est nulle pour tous $\Delta\Psi(\Gamma_1)$, $\Delta\Psi(\Gamma_2)$, $(H - E)\Psi(\Gamma_1) = 0$, $(H - E)\Psi(\Gamma_2) = 0$, $\Psi(\Gamma_1)$ et $\Psi(\Gamma_2)$ sont solutions de l'équation de Schrödinger et réciproquement.

On voit ainsi que l'introduction de fonctions radiales non nulles à l'infini modifie par l'introduction du terme en $\frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2}$ le principe variationnel usuel

pour des états liés.

Notons toutefois que si, pour la diffusion, l'équation variationnelle $\Delta[\langle \Psi(\Gamma_1), (H - E) \Psi(\Gamma_2) \rangle] = 0$ n'est plus vraie on a encore

$$\langle \Delta \Psi(\Gamma_1), (H - E) \Psi(\Gamma_2) \rangle = 0.$$

L'équation de Schrödinger étant généralement insoluble, l'avantage d'une équation variationnelle réside dans le fait que l'on peut, au lieu de considérer des variations tout à fait arbitraires, se limiter à une classe de fonctions à faire varier et choisir, dans cette classe, la ou les meilleures fonctions du point de vue variationnel. Il y a plusieurs façons de se restreindre : on peut d'abord prendre, au lieu d'une somme infinie, un développement fini du type (4) et faire varier, par conséquent, un nombre fini de fonctions $F_{\Gamma}(\Gamma')$. On obtient alors un ensemble d'équations intégral-différentielles couplées par application de (7)

$$(8) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_{\Gamma}(l_{\Gamma} + 1)}{r^2} + k_{\Gamma}^2 \right] F_{\Gamma}(\Gamma' | r) = 2 \sum_{\Gamma''} \left\{ V_{\Gamma\Gamma''} - W_{\Gamma\Gamma''} \right\} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r),$$

$$\text{où} \quad V_{\Gamma\Gamma''}(r_{N+1}) = \int \psi_{\Gamma}^*(r^{(N+1)}) \left[\frac{-Z}{r_{N+1}} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_{N+1,i}} \right] \psi_{\Gamma''}(r^{(N+1)}) dr^{(N+1)},$$

$$W_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_{N+1}) = r_{N+1} N \int \psi_{\Gamma}^*(r^{(N+1)}) (H - E) \psi_{\Gamma''}(r^{(N)}) \frac{1}{r_N} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_N) dr^{(N+1)}.$$

$\sum_{\Gamma''}'$ désigne une somme sur un nombre fini d'états intermédiaires Γ'' . On peut aussi restreindre encore la classe de fonctions « variables » en prenant, outre une somme finie, des fonctions dont la forme analytique est choisie et dont la seule liberté réside dans l'indétermination de certains paramètres. L'application de l'équation variationnelle (7) détermine alors ces paramètres.

On peut aussi prendre comme fonctions d'essai une combinaison linéaire de fonctions numériques données et en calculer variationnellement les coefficients [10].

Enfin, une dernière possibilité nous est offerte par les équations (7). Supposons qu'une fonction d'essai $\Psi^E(\Gamma')$ nous soit donnée comme résultat d'une approximation. On peut alors améliorer variationnellement la matrice de réactance R^E ainsi obtenue.

Si, en effet, $\Psi(\Gamma')$ désigne la solution exacte, on peut écrire $\Psi^E = \Psi + \Delta\Psi$. Si alors l'approximation est bonne, $\Delta\Psi$, considéré comme variation de Ψ , sera petit ; par suite on aura

$$(9) \quad \langle \Psi^E(\Gamma_1), (H - E) \Psi^E(\Gamma_2) \rangle = \frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2}^E - \langle \Psi(\Gamma_1), (H - E) \Psi(\Gamma_2) \rangle + \frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2} = O(\Delta\Psi^2).$$

Par suite, une valeur améliorée de $R_{\Gamma_1\Gamma_2}$ sera

$$(10) \quad \frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2}^A = \frac{1}{2} R_{\Gamma_1\Gamma_2}^E - \langle \Psi^E(\Gamma_1), (H - E) \Psi^E(\Gamma_2) \rangle.$$

L'équation (10) peut ainsi servir de test pour savoir si une approximation est bonne ; en général, Ψ^E sera solution d'une équation approchée dans laquelle H est remplacé par un hamiltonien simplifié : $(H^E - E) \Psi^E = 0$. Par suite si on pose $H^E = H + \Delta H$, (10) s'écrit

$$(11) \quad R_{\Gamma_1\Gamma_2}^A = R_{\Gamma_1\Gamma_2}^E + 2 \langle \Psi^E(\Gamma_1), \Delta H \Psi^E(\Gamma_2) \rangle.$$

L'approximation de Ψ par Ψ^E sera bonne si R^A est peu différent de R^E . Un exemple classique consiste à prendre $R^E = 0$, $F_I^E(\Gamma') = \delta_{I\Gamma'} \eta_I(kr/r)$, l'équation (11) donne alors l'approximation de Born.

Ces questions sont traitées notamment dans [1], [2] et [3].

Nous pouvons maintenant aborder l'atome de sodium. Nous allons dériver des équations intégral-différentielles du type (8). Ces équations seront supposées exactes et, dans certains cas, elles seront résolues complètement. Les équations variationnelles seront aussi utilisées, soit pour trouver la meilleure fonction d'un type donné, soit pour améliorer l'approximation du champ central et évaluer l'ordre de grandeur des termes négligés.

4. Application à l'étude du choc électron-atome hydrogénoïde. —

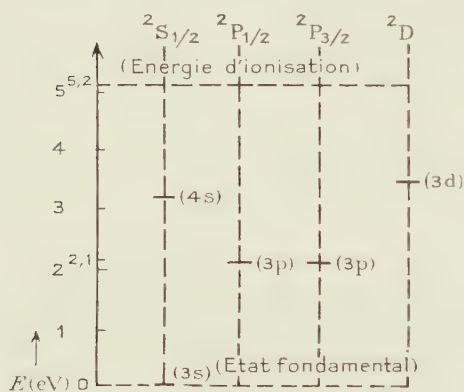


FIG. 1. — Principaux états excités du sodium.

d'abord sommairement l'atome de sodium neutre ; il a 11 électrons répartis suivant les couches 1s, 2s, 2p et 3s. Les couches 1s, 2s, 2p sont complètes et le 11^{me} électron — l'électron de valence — se trouve, lorsque l'atome est dans son état fondamental, sur la couche 3s. Le premier état excité (fig. 1) est un état dans lequel l'électron de valence est sur la couche 3p (il y a en fait un doublet : un état $^2P_{1/2}$ et un état $^2P_{3/2}$; les transitions $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$, $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ vers le fondamental $^2S_{1/2}$ donnent lieu à l'émission des deux raies D du sodium).

Il est commode de repérer les états excités du sodium par la position de l'électron de valence ; un état α sera alors défini par la donnée de $n, L : \alpha = (1s^2, 2s^2, 2p^6, nL)$. $E(nL)$ sera l'énergie de l'état α ; $E(nL) = E_\alpha$ et, au lieu d'écrire pour l'électron de choc, $\frac{1}{2} k_\alpha^2 = E - E_\alpha$, nous écrirons $\frac{1}{2} k_{nL}^2 = E - E(nL)$.

Quand il n'y aura aucun risque de confusion sur la valeur de n , nous écrirons simplement k_L^2 ou même k_s^2, k_p^2, k_d^2 .

L'atome de sodium est un atome hydrogénoïde ; il est donc intéressant de considérer d'abord le cas de l'hydrogène traité notamment dans [1]. Les équations doivent être formellement identiques dans les deux cas lorsque l'électron diffusé est loin de l'atome. Nous pouvons alors fonder nos approximations physiques sur l'hydrogène.

1. Equations de choc pour l'hydrogène. —

$$\Psi(\Gamma') = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_1 \left[\psi_\Gamma(r^{(2)}) \frac{1}{r_2} F_\Gamma(\Gamma' | r_2) - \psi_\Gamma(r^{(1)}) \frac{1}{r_1} F_\Gamma(\Gamma' | r_1) \right],$$

$$\alpha = n, L ; \gamma = n, L, l, M_L, m_l, m_s ; \Gamma = n, L, l, S, L^T, S^T, M_L^T, M_S^T,$$

$$H(2) = H_1(1) + H_2(2) + (1/r_{12}).$$

Utilisant le développement $1/r_{12} = \sum_\lambda U_\lambda(r_1, r_2) P_\lambda(\hat{r}_1) P_\lambda(\hat{r}_2)$,

où $U_{\lambda}(r_1, r_2) = r_{<}^{\lambda}/r_{>}^{\lambda+1}$, les équations (8) deviennent :

1° pour $V_{\Gamma\Gamma''}$,

$$(12) \quad V_{\Gamma\Gamma''} = -\frac{\delta(\Gamma, \Gamma'')}{r} + \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \psi_{\mathbf{S}^T \mathbf{M}_{\mathbf{S}}^T}^*(\sigma_1, \sigma_2) \psi_{\mathbf{S}''^T \mathbf{M}_{\mathbf{S}}''^T}(\sigma_1, \sigma_2) \times \\ \times \sum \langle n \mathbf{L} | U_{\lambda}(r_1, r_2) | n'' \mathbf{L}'' \rangle \langle \mathbf{L} \mathbf{l} \mathbf{L}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T | P_{\lambda}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \mathbf{L}'' \mathbf{l}'' \mathbf{L}''^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T \rangle.$$

L'intégration sur les spins donne $\delta_{\mathbf{S}^T \mathbf{S}''^T} = \delta_{\mathbf{M}_{\mathbf{S}}^T \mathbf{M}_{\mathbf{S}}''^T}$. L'intégration sur les angles donne

$$(13) \quad \langle \mathbf{L} \mathbf{l} \mathbf{L}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T | P_{\lambda}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \mathbf{L}'' \mathbf{l}'' \mathbf{L}''^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T \rangle = \delta_{\mathbf{L}^T \mathbf{L}''^T} \delta_{\mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T} f_{\lambda}(\mathbf{L} \mathbf{l}, \mathbf{L}'' \mathbf{l}'', \mathbf{L}^T),$$

où f_{λ} est une quantité indépendante de $\mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T$ s'exprimant en fonction des coefficients de Racah. $f_{\lambda} \neq 0$ seulement si $(-1)^{L+1} = (-1)^{L''+1}$ [conservation de la parité].

$$(14) \quad \langle n \mathbf{L} | U_{\lambda}(r_1, r_2) | n'' \mathbf{L}'' \rangle = \frac{1}{r_2^{\lambda+1}} \int_0^{r_2} P_{n\mathbf{L}}(r_1) r_1^{\lambda} P_{n''\mathbf{L}''}(r_1) dr_1 + \\ + r_2^{\lambda} \int_{r_2}^{\infty} P_{n\mathbf{L}}(r_1) \frac{1}{r_1^{\lambda+1}} P_{n''\mathbf{L}''}(r_1) dr_1.$$

On posera dorénavant $\langle n \mathbf{L} | U_{\lambda}(r_1, r_2) | n'' \mathbf{L}'' \rangle = y_{\lambda}(n \mathbf{L}, n'' \mathbf{L}'' | r_2)$;

2° pour $W_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}$, le terme en $1/r_{12}$ de $H - E$ va donner une expression pour $W_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}$ semblable à $V_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}$; il faut échanger $F_{\Gamma''}$ et $P_{n''\mathbf{L}''}$ et substituer, par conséquent, à $\langle \mathbf{L} \mathbf{l} \mathbf{L}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T | P_{\lambda}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \mathbf{L}'' \mathbf{l}'' \mathbf{L}''^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T \rangle$ la quantité $\langle \mathbf{L} \mathbf{l} \mathbf{L}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T | P_{\lambda}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \mathbf{l}'' \mathbf{L}'' \mathbf{L}''^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T \rangle$ { on introduit dans [1] outre f_{λ} , la quantité $g_{\lambda}(\mathbf{L} \mathbf{l}, \mathbf{L}'' \mathbf{l}'', \mathbf{L}^T) = (-1)^{L+1-L^T} \langle \mathbf{L} \mathbf{l}; \mathbf{L}^T | P_{\lambda}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \mathbf{l}'' \mathbf{L}''; \mathbf{L}^T \rangle$ }. Les termes en $H_i(1)$,

$$\int \psi_{\Gamma}^*(r^{(2)}) [H_1(1) + H_2(1) - E] \psi_{\Gamma''}(r^{(1)}) \frac{1}{r_1} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_1) dr^{(2)} = \\ \int \psi_{\Gamma}^*(r^{(2)}) [H_1(1) - E_{n''} - E] \psi_{\Gamma''}(r^{(1)}) \frac{1}{r_1} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_1) dr^{(2)} = (\text{par hermiticité}) \\ \int \psi_{\Gamma''}(r^{(1)}) \frac{1}{r_1} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_1) \{ [H_1(1) + E_{n''} - E] \psi_{\Gamma}(r^{(2)}) \}^* dr^{(2)} = \\ (E_n + E_{n''} - E) (-1)^{1-S^T} g_0(\mathbf{L} \mathbf{l}, \mathbf{L}'' \mathbf{l}'', \mathbf{L}^T) \Delta[P_{n\mathbf{L}}, F_{\Gamma''}(\Gamma')] P_{n''\mathbf{L}''}(r_2) \delta_{\mathbf{L}^T \mathbf{L}''^T} \times \\ \times \delta_{\mathbf{M}_{\mathbf{L}}^T \mathbf{M}_{\mathbf{L}}''^T} \delta_{\mathbf{S}^T \mathbf{S}''^T} \delta_{\mathbf{M}_{\mathbf{S}}^T \mathbf{M}_{\mathbf{S}}''^T}.$$

On obtient finalement les équations

$$(15) \quad \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\Gamma(\Gamma+1)}{r^2} + k_{n\mathbf{L}\Gamma}^2 \right] F_{k_{\Gamma}\mathbf{L}\Gamma}^{\mathbf{L}^T \mathbf{S}^T}(\Gamma' | r) = 2 \sum (V_{\Gamma\Gamma''} - W_{\Gamma\Gamma''}) F_{\Gamma''}(\Gamma' | r), \\ \text{avec } V_{\Gamma\Gamma''} = -\frac{\delta_{\Gamma\Gamma''}}{r} + \sum_{\lambda} f_{\lambda}(\mathbf{L} \mathbf{l}, \mathbf{L}'' \mathbf{l}'', \mathbf{L}^T) y_{\lambda}(n \mathbf{L}, n'' \mathbf{L}'' | r); \\ W_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r) = (-1)^{1-S^T} \sum g_{\lambda}(\mathbf{L} \mathbf{l}, \mathbf{L}'' \mathbf{l}'', \mathbf{L}^T) [\delta_{\lambda,0}(E_n + \\ + E_{n''} - E) \Delta(n \mathbf{L}, k_{\Gamma''}) + y_{\lambda}(n \mathbf{L}, k_{\Gamma''} | r)] P_{n''\mathbf{L}''}(r), \\ \text{avec } \Delta(n \mathbf{L}, n' \mathbf{L}') = \int_0^{\infty} P_{n\mathbf{L}}(r) P_{n'\mathbf{L}'}(r) dr. \end{array} \right.$$

Nous allons voir maintenant comment ces équations doivent être modifiées pour le sodium ; avant cela donnons d'abord quelques valeurs des coefficients f_λ et g_λ et faisons quelques remarques.

1° $f_\lambda(L\ 1, L''\ 1''; L^T) = 0$ sauf si $(-1)^{\lambda+L+L'} = 1$, $(-1)^{\lambda+1+1'} = 1$ et si λ, L, L'' d'une part et $\lambda, 1, 1''$ d'autre part peuvent constituer les trois côtés d'un triangle.

$f_\lambda(L\ 1, L\ 1, L^T) \neq 0$ pour $0 \leq \lambda \leq \min\{2L, 2\ 1\}$, λ pair ;

$f_0(L\ 1, L\ 1, L^T) = 1$ ($\lambda = 0$ seulement si $L = L'', 1 \equiv 1''$) ;

si $L'' \neq L$, $f_\lambda(L\ 1, L''\ 1'', L^T) \neq 0$ pour $\lambda = 1$ seulement si $L'' = L \pm 1, 1'' = 1 \mp 1$.

2° $g_\lambda = (-1)^{L+1-L^T} f_\lambda(L\ 1, 1''\ L'', L^T)$ donne un terme avec $\lambda = 0$ seulement si $L = 1'', 1 = L''$.

g_λ donne un terme avec $\lambda = 1$, seulement si $1'' = L \pm 1, L'' = 1 \pm 1$. Par suite, d'après (15) on aura

$$(16) \quad \begin{cases} V_{\Gamma\Gamma} = V_{nL1, nL1}^{L^T} = -\frac{1}{r} + y_0(n\ L, n\ L\ |r) + \\ \quad + \sum_{\lambda \neq 0} f_\lambda(L\ 1, L\ 1, L^T) y_\lambda(n\ L, n\ L\ |r), \\ V_{\Gamma\Gamma''} = V_{nL1, n''L''1''}^{L^T} = \sum_{\lambda} f_\lambda(L\ 1, L''\ 1'', L^T) y_\lambda(n\ L, n''\ L''\ |r). \end{cases}$$

$$\text{Or} \quad y_\lambda(n\ L, n''\ L''\ |r) \sim \frac{1}{r^{\lambda+1}} \int_0^\infty P_{nL}(r) P_{n''L''}(r) dr.$$

Par suite, on peut faire les constatations suivantes :

si $\Gamma = \Gamma''$, on a dans $V_{\Gamma\Gamma''}$ un terme en y_0 qui compense le champ coulombien $[(1/r) - y_0(nL, nL\ |r)]$ n'est autre que le champ central de Hartree-Fock] et, par suite, on voit que dans le cas du sodium on aura

$V_{\Gamma\Gamma} = -(11/r) + 2 y_0(1s, 1s) + 2 y_0(2s, 2s) + 6 y_0(2p, 2p) + y_0(n\ L, n\ L) +$
 + termes en $1/r^2$ au moins quand $r \rightarrow \infty$;

si $\Gamma \neq \Gamma''$, a) le couplage entre $\Gamma = n, L, 1$ et $\Gamma'' = n'', L, 1$ décroît exponentiellement du fait de l'orthogonalité des fonctions radiales $P_{nL}, P_{n''L}$; b) le couplage le plus fort se fera pour $\Gamma'' = n'', L \pm 1, 1 \mp 1$ ($\lambda = 1$).

$$V_{n,L,1,n'',L\pm 1,1\mp 1} \sim (S_{nL,n''L} \pm 1)/r^2,$$

avec

$$S_{nL,n''L} = \int_0^\infty P_{nL} r P_{n''L} dr.$$

Enfin, les termes d'échange $W_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma\Gamma''}$ tendent vers 0 exponentiellement quand $r \rightarrow \infty$.

2. *Passage de l'hydrogène au sodium ; détermination des états intermédiaires.* — Ainsi que nous l'avons vu, nous aurons pour le sodium un champ central de la forme

$$V_{nL1, nL1}^{L^T} = -(11/r) + 2 y_0(1s, 1s\ |r) + 2 y_0(2s, 2s\ |r) + 6 y_0(2p, 2p\ |r) + \\ + y_0(n\ L, n\ L\ |r) + C(n\ L\ 1\ |r),$$

où $C(n\ L\ 1\ |r) \sim O(1/r^2)$.

Nous allons maintenant montrer comment, dans le cas du sodium, on peut choisir un nombre fini d'états intermédiaires. En mécanique classique, on peut montrer qu'un électron lent, très éloigné de l'atome, se trouve plongé dans un potentiel $U = -\alpha/r^4$, où r est la distance atome-électron, α la polarisabilité de l'atome (hypothèse adiabatique). Il en résulte que pour de faibles énergies, ce potentiel en $1/r^4$ doit apparaître dans les équations (15) ; c'est ce qui a été montré dans [4].

Supposons que l'énergie de l'électron incident soit trop faible pour exciter l'atome, initialement dans l'état fondamental $3s$: $E = E(3s) + \frac{1}{2} k_{3s}^2 k_3^2 \geq 0$, mais $k_{nL}^2 < 0$ pour $L \neq 0$. Il en résulte alors que les formes asymptotiques des solutions de (15) sont, puisque $F_{k_{nL}L}^{L^T S^T}(\infty) = 0$ pour $L \neq 0$,

$$F_{k_{3s}0}^{L^T S^T} \sim \sin\left(k_{3s} r - \frac{l_0 \pi}{2} + \delta_{l_0}\right), \quad F_{k_{nL}L}^{L^T S^T} \sim -\frac{2 f_\lambda(0, l_0, L, L^T)}{k_{nL}^2 - k_{3s}^2} \frac{F_{k_{3s}0}^{L^T S^T}(r)}{r^{\lambda+1}}.$$

En reportant cette expression dans l'équation de $F_{k_{3s}0}^{L^T S^T}$ on trouve bien alors un terme en $1/r^4$ si $\lambda = 1$, c'est-à-dire si $L = +1$.

Nous voyons alors comment on peut obtenir un critère pour la sélection des états intermédiaires Γ'' : la polarisation étant prédominante asymptotiquement, on peut convenir de ne prendre que les Γ'' qui donnent le potentiel de polarisation. Ces Γ'' sont de la forme $\Gamma'' = n'' | L \pm 1$ si $L^T \neq 0$, $\Gamma'' = L^T + 1$ si $L^T = 0$. On peut vérifier alors que

$$\alpha = 2 \sum_{n''=3}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{P_{n''p}(r) P_{3s}(r) r dr}{E(n''p) - E(3s)}.$$

On prendra donc autant d'états n'' qu'il faut pour que le reste de la série soit négligeable [2, 4]. Dans le cas du sodium, 99,4 % de la polarisation est donnée par le premier terme de la série ; par suite on peut se borner à la seule considération de $3p$ [5].

L'argumentation développée ci-dessus n'est à priori plus valable pour de plus hautes énergies, mais on peut alors recourir à l'approximation de Born ou à une variante, pour calculer la section inélastique $3s \rightarrow 3p$ en ne tenant compte que du seul couplage $3s, 3p$. On peut alors comparer la section inélastique totale expérimentale à la section ainsi calculée et voir que cette dernière est proche de la section expérimentale pour de hautes énergies (fig. 2).

L'approximation de Born,

lorsqu'on décompose l'onde plane en ondes partielles, donne pour la matrice

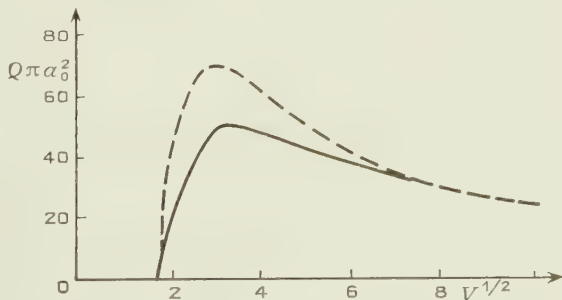


FIG. 2. — Section inélastique pour le sodium :
 — — — section calculée par l'approximation de Born
 et Bethe [7, 8] ;
 — section expérimentale élastique totale [9].

de réactance R [6]

$$(17) \quad R_{nL1, n'L'1'}^{LT} = -\frac{\pi}{2} \int_0^\infty J_{1+(1/2)}(k_{nL} r) V_{nL1, n'L'1'}^{LT} J_{1'+(1/2)}(k_{n'L'} r) r dr.$$

Si L^T est grand et si $L = 0$, $L' = 1$, l'intégrale ci-dessus est peu sensible au potentiel au voisinage de l'origine et, par suite, on peut remplacer V par sa forme asymptotique $f_{\lambda}(0 | 1, 1'; L^T) S_{s,p} r^2$ où $S_{s,p} = \int_0^\infty P_{3s} r P_{3p} dr$. L'approximation ainsi faite est équivalente à l'approximation de Bethe qui substitue $1 + i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}$ à $\exp[i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}]$ (cf. [7]).

Nous pouvons nous résumer de la façon suivante : aux faibles énergies, la seule considération des états $3s, 3p$ permet de retrouver asymptotiquement le potentiel de polarisation qui demeure la seule interaction dominante pour un atome neutre ; aux hautes énergies, où les sections inélastiques prédominent, la seule considération des états $3s \rightarrow 3p$ permet d'approcher suffisamment la section inélastique totale.

5. Dérivation des équations intégral-différentielles pour le sodium. — Nous aurons besoin pour dériver nos équations de connaître celles des fonctions radiales de l'atome de sodium ; aussi allons-nous rappeler brièvement comment elles peuvent être obtenues. On considère d'abord le sodium ionisé Na^+ de composition $(1s^2, 2s^2, 2p^6)$ dont on détermine les orbitales variationnellement, puis on ajoute à ce système un électron supplémentaire de façon à obtenir le sodium neutre. L'orbitale de l'électron de valence est ensuite déterminée variationnellement en supposant les orbitales des couches $1s, 2s, 2p$ non modifiées par l'adjonction de l'électron de valence au système (se reporter pour ce paragraphe à [3, 11, 12, 2 et 8]).

1. Fonctions radiales pour Na^+ . — On suppose que la fonction d'onde du système peut être représentée par une somme de produits antisymétrisée d'orbitales a_i ($i = 1, 2, \dots, 10$), de sorte que si l'électron j est dans l'état i , sa fonction d'onde est $a_i(\vec{x}_j)$. La fonction d'onde est alors un déterminant de Slater

$$(18) \quad D(A) = D(a_1, \dots, a_{10}) = \frac{1}{\sqrt{10!}} \begin{vmatrix} a_1(\vec{x}_1) & a_2(\vec{x}_1) & \dots & a_{10}(\vec{x}_1) \\ a_1(\vec{x}_2) & a_2(\vec{x}_2) & \dots & a_{10}(\vec{x}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_1(\vec{x}_{10}) & a_2(\vec{x}_{10}) & \dots & a_{10}(\vec{x}_{10}) \end{vmatrix}.$$

Comme une transformation $a_i(x) \rightarrow a_i(x) + \sum_{j \neq i} C_{ij} a_j(x)$ ne modifie pas $D(A)$, on peut imposer les conditions $N_{ij} = \int a_i^*(\vec{x}) a_j(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{ij}$. Les orbitales sont alors déterminées par la condition variationnelle

$$\Delta \langle a_1 \dots a_{10} | H(10) | a_1 \dots a_{10} \rangle = 0;$$

on obtient ainsi [12]

$$E = \int D^* H(10) D d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{10} = \sum_{i=1}^{10} \langle a_i | H_i(1) | a_i \rangle +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{10} \left\langle a_i a_j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| a_i a_j \right\rangle - \left\langle a_i a_j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| a_j a_i \right\rangle,$$

avec

$$\begin{aligned} \langle a_i | H_i(1) | a_j \rangle &= \int a_i^*(\vec{x}) \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] a_j(\vec{x}) d\vec{x}, \\ \langle a_i a_j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| a_k a_l \rangle &= \int a_i^*(\vec{x}_1) a_j^*(\vec{x}_2) \frac{1}{r_{12}} a_k(\vec{x}_1) a_l(\vec{x}_2) d\vec{x}_1 d\vec{x}_2. \end{aligned}$$

Comme il faut, en outre, tenir compte des relations d'orthogonalité l'expression à minimiser est $E' = E - \sum_i E_i N_{ii}$, où E_i est un paramètre de Lagrange, ce qui donne

$$(19) \quad H_{HF} a_i = E_i a_i, \quad \text{où } H_{HF} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{11}{r} + V - W,$$

avec

$$V a_i = \sum_{j=1}^{10} v(a_j a_j) a_i, \quad W a_i = \sum_{j=1}^{10} v(a_j a_i) a_j$$

et

$$v(a_i a_j | \vec{x}) = \int a_i^*(\vec{x}_1) a_j(\vec{x}_1) \frac{d\vec{x}_1}{|\vec{r} - \vec{x}_1|};$$

E_i est choisi de façon que l'on ait $N_{ii} = 1$.

La réduction des intégrales, toujours en utilisant les techniques de [12], donne pour les termes électrostatiques en $1/r_{ij}$:

$$1^0 \quad 2(2l+1)(2l'+1) \left[2 F_0(n l, n' l') - \frac{1}{2} \sum_{\lambda} C_{1\lambda 1'} G_{\lambda}(n l, n' l') \right]$$

pour deux couches complètes $(n l)$, $(n' l')$; le facteur est $2l+1$ pour un électron $(n' l')$ avec la couche $(n l)$;

$$2^0 \quad (2l+1)^2 \left[2 F_0(n l, n l) - \frac{1}{2} \sum_{\lambda} C_{1\lambda 1} G_{\lambda}(n l, n l) \right]$$

pour tous les électrons de $(n l)$, soit encore

$$(2l+1)^2 \left[F_0(n l, n l) - \frac{1}{2l+1} F_0(n l, n l) - \frac{1}{2} \sum_{\lambda \neq 0} C_{1\lambda 1} G_{\lambda}(n l, n l) \right];$$

les termes diagonaux $\langle a_i | H(1) | a_i \rangle$ donnent $2(2l+1) I(n l)$, avec

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{Z}{r}, \quad I(n l) = \int_0^{\infty} P_{n l} \mathcal{K}_1 P_{n l} dr$$

($P_{n l}$ désignant les fonctions radiales solutions des équations de Hartree-Fock).

$$R_{\lambda}(a, b, c, d) = \int_0^{\infty} P_a y_{\lambda}(b, d | r) P_b dr, \quad F_{\lambda}(a, b) = R_{\lambda}(a, b, a, b),$$

$$G_{\lambda}(a, b) = R_{\lambda}(a, a, b, b); \text{ on a } F_{\lambda}(a, a) = G_{\lambda}(a, a).$$

$C_{1\lambda 1'}$ désigne le coefficient $\int_{-1}^{+1} P_l(t) P_{\lambda}(t) P_{l'}(t) dt$ (calculé numériquement dans [12]). Si E^+ désigne l'énergie de Na^+ ,

$$(20) \quad E^+ = \int D^*(a_1, \dots, a_{10}) H(10) D(a_1, \dots, a_{10}) d\tau = 2 I(1s) +$$

$$\begin{aligned}
& + 2 I(2s) + 6 I(2p) + F_0(1s, 1s) + 12 F_0(1s, 2p) - 2 G_1(1s, 2p) + \\
& + F_0(2s, 2s) + 12 F_0(2s, 2p) - 2 G_1(2s, 2p) + 4 F_0(1s, 2s) - \\
& - G_0(1s, 2s) + 15 F_0(2p, 2p) - \frac{6}{5} F_2(2p, 2p) .
\end{aligned}$$

Cette expression est explicitement donnée dans [11].

Cela donne les équations pour les fonctions radiales :

$$\begin{aligned}
\left[\mathcal{H}_0 + v - y_0(1s, 1s | r) + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{1s,1s} \right] P_{1s} - y_0(1s, 2s | r) P_{2s} - y_1(1s, 2p | r) P_{2p} , \\
\left[\mathcal{H}_0 + v - y_0(2s, 2s | r) + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{2s,2s} \right] P_{2s} - y_0(1s, 2s | r) P_{1s} - y_1(2s, 2p | r) P_{2p} , \\
\left[\mathcal{H}_1 + v - y_0(2p, 2p | r) - \frac{2}{5} y_2(2p, 2p | r) + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{2p,2p} \right] P_{2p} = \\
= \frac{1}{3} y_1(1s, 2p | r) P_{1s} + \frac{1}{3} y_1(2s, 2p | r) P_{2s} - \frac{1}{2} \mathcal{C}_{n1,n1} = E_i ;
\end{aligned}$$

ce sont les paramètres de Lagrange.

$$v = 2 y_0(1s, 1s | r) + 2 y_0(2s, 2s | r) + 6 y_0(2p, 2p | r) .$$

2. Adjonction d'un électron de valence ; équations radiales du sodium neutre. —

On néglige la perturbation créée sur les orbitales internes 1s, 2s, 2p par l'adjonction de l'électron de valence. Cela veut dire que la fonction d'onde est représentée par un déterminant de Slater de la forme $D(a_1, a_2, \dots, a_{10}, b)$ dans lequel les a_i sont les orbitales de Na^+ et b l'orbitale de l'électron de valence. b est alors déterminé par une condition variationnelle :

$$\Delta \langle a_1 \dots a_{10} b | H(11) | a_1 \dots a_{10} b' \rangle = 0 \quad (\text{seuls les } b \text{ varient}).$$

On peut, sans restriction, imposer encore $\langle a_1 | b \rangle = 0$ mais il faut introduire un paramètre de Lagrange $-\frac{1}{2} \mathcal{C}_b$ pour tenir compte de $\langle b | b \rangle = 1$.

Suivant toujours [11] et [12], l'énergie supplémentaire introduite par l'électron de valence $b = n, L$ est $E_{nL} = I(n L) + \mathcal{C}(n L, n L)$, avec

$$\begin{aligned}
(21) \quad \mathcal{C}(n L, n' L') &= \delta_{LL'} \left[2 R_0(1s, n L, 1s, n' L') - \right. \\
&- \frac{1}{2L+1} R_L(1s, 1s, n L, n' L') + 2 R_0(2s, n L, 2s, n' L') - \\
&- \frac{1}{2L+1} R_L(2s, 2s, n L, n' L') + 6 R_0(2p, n L, 2p, n' L') - \\
&\quad \left. - \frac{3}{2} \sum_{\lambda} C_{\lambda 1} R_{\lambda}(2p, 2p, n L, n' L') \right],
\end{aligned}$$

$$E = \int D^*(a_1 - b) H(11) D(a_1 - b) d\tau = E^+ + E_{nL} .$$

L'équation vérifiée par $P_b = P_{nL}$ est alors, en faisant varier E ,

$$\begin{aligned}
(22) \quad \left(\mathcal{H}_1 + v + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{nLnL} \right) P_{nL} &= \frac{1}{2L+1} \left[y_L(1s, n L | r) P_{1s} + \right. \\
&+ y_L(2s, n L | r) P_{2s} + \frac{3L}{3L-1} y_{L-1}(1p, n L | r) P_{2p} +
\end{aligned}$$

$$+ \frac{3L+3}{2L+3} y_{L+1}(2p, nL | r) P_{2p} \Big],$$

$E_{nL} = -\frac{1}{2} C_{nLnL}$, $C_{101} = 2/(2L+1)$; ces équations ont été résolues pour la première fois dans [14] et plus récemment dans [15].

3. *Equations pour la collision électron-sodium.* Γ' étant une voie d'entrée permettant de spécifier les conditions aux limites, la fonction d'onde du système atome-électron s'écrit

$$\Psi(\Gamma') = \mathcal{A} \sum_{\Gamma''} \psi_{\Gamma''}(r^{(i)}) \frac{1}{r_i} F_{\Gamma''}(\Gamma' | r_i).$$

La fonction d'onde s'écrit sous forme d'une combinaison linéaire de déterminants de Slater $D(a_1, \dots, a_{10}, b, \Phi)$.

Posons $L(\Gamma_1, \Gamma_2) = \langle \Psi(\Gamma_1), [H(12) - E]\Psi(\Gamma_2) \rangle$. Comme L^T et L_Z^T commutent avec $H(12)$, $L(\Gamma_1, \Gamma_2)$ est une somme de termes de la forme

$$\langle 1s^2, 2s^2, 2p^6, nL, kl; L^T S^T | H(12) - E | 1s^2, 2s^2, 2p^6, n' L', k' l'; L^T S^T \rangle$$

dans lequel $L, L' = 0$ ou 1 .

Le calcul est analogue au calcul de configuration où il y a deux électrons et des couches complètes.

Si $|nL, kl, L^T S^T\rangle$ désigne une fonction d'onde antisymétrisée, on va, en développant l'élément de matrice ci-dessus, retrouver les termes (a) et (b), obtenus dans les paragraphes I. 5. 1 et I. 5. 2, auxquels vont s'ajouter les termes d'interaction électrostatique des électrons périphériques nL, kl avec les couches complètes, les termes diagonaux des électrons périphériques et les termes représentant leur propre interaction. On a donc [31]

$$\begin{aligned} & \langle 1s^2, \dots, nL, kl; L^T S^T | H(12) | 1s^2, \dots, n' L', k' l'; L^T S^T \rangle = \\ & = \langle nL, kl, L^T S^T | n' L', k' l', L^T S^T \rangle E^+ \quad (a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (\text{où } \langle nL, kl, L^T S^T | n' L', k' l', L^T S^T \rangle = \langle nL | n' L' \rangle \langle kl | k' l' \rangle + \\ & + (-1)^{L+1-L^T-S^T} \langle nL | k' l' \rangle \langle kl | n' L' \rangle) \end{aligned}$$

$$+ \langle nL | n' L' \rangle \mathcal{C}(nL, k' l') + \langle kl | k' l' \rangle \mathcal{C}(nL, n' L') \quad (b)$$

$$+ (-1)^{L+1-L^T-S^T} [\langle nL | k' l' \rangle \mathcal{C}(kl, n' L') + \langle kl | n' L' \rangle \mathcal{C}(nL, k' l')]$$

(termes d'interaction — échange des électrons périphériques avec les couches internes — ces termes ne disparaissent pas, $|nL\rangle$ et $|kl\rangle$ n'étant pas orthogonaux) + des termes purement hydrogéniques, exactement identiques à ceux de [1] à savoir $\langle nL, kl; L^T S^T | H(2) | n' L', k' l'; L^T S^T \rangle$ [ce qui se décompose en deux termes diagonaux similaires aux $I(nl)$ et en deux termes analogues d'échange

$$\begin{aligned} & \langle nL | n' L' \rangle \langle kl | H(1) | k' l' \rangle + \langle kl | k' l' \rangle \langle nL | H(1) | n' L' \rangle + \\ & + (-1)^{L+1-L^T-S^T} \{ \langle nL | k' l' \rangle \langle kl | H(1) | n' L' \rangle + \\ & + \langle kl | n' L' \rangle \langle nL | H(1) | k' l' \rangle \}, \end{aligned}$$

puis en des termes d'interaction entre les deux électrons périphériques et leur correspondant en échange :

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} f_{\lambda}(L \mid L', L'; L^T) R_{\lambda}(n \mid L, k \mid L', k' \mid L') + \\ + (-1)^{L+1-L^T-S^T} f_{\lambda}(L \mid L', L'; L^T) R_{\lambda}(n \mid L, n' \mid L', k \mid L, k' \mid L')].$$

L'introduction du facteur $(-1)^{L+1-L^T-S^T}$ vient de l'évaluation d'éléments de matrice avec des fonctions de deux particules complètement antisymétrisées [13].

Appliquant ensuite la condition variationnelle

$$\langle \delta \Psi(\Gamma_1), [H(12) - E] \Psi(\Gamma_2) \rangle = 0,$$

on trouve les équations

$$(23) \quad \left[\mathcal{H}_{\text{HF}}^{(1)} - \frac{1}{2} k_{nL}^2 \right] F_{nLkL}^{L^T S^T} = - \sum_{\lambda, n, L', L'} \left\{ f_{\lambda}(L \mid L', L'; L^T) y_{\lambda}(n \mid L, n' \mid L', r) \times \right. \\ \times F_{n'L'k'1'}^{L^T S^T} - (-1)^{L+1-L^T-S^T} \left[\delta_{\lambda 0} \delta_{L1'} \delta_{1L'} \left(-\frac{1}{2} c_{nL} - \frac{1}{2} k^2 \right) (n \mid L, k' \mid L') + \right. \\ \left. \left. + f_{\lambda}(L \mid L', L'; L^T) y_{\lambda}(n \mid L, k' \mid L') \right] P_{n'L'} \right\},$$

où $\mathcal{H}_{\text{HF}}^{(1)} = \mathcal{H}^{(1)} + v - W^{(1)}$, avec

$$W^{(1)} F = \frac{1}{21+4} \left[y_1(1s, F) P_{1s} + y_1(2s, F) P_{2s} + \frac{31}{21-4} y_{1-1}(2p, F) P_{2p} + \right. \\ \left. + \frac{31+3}{21+4} y_{1+1}(2p, F) P_{2p} \right].$$

Ces équations sont identiques à celles de l'hydrogène si on remplace $\mathcal{H}_{\text{HF}}^{(1)}$ par

$$\mathcal{H}^{(1)} = -\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{1}{r}.$$

On a supposé en calculant $L(\Gamma_1, \Gamma_2)$ que l'on avait

$$(24) \quad \langle 1s \mid k \mid \rangle = \langle 2s \mid k \mid \rangle = 0 \text{ pour } l = 0, \langle 2p \mid k \mid \rangle = 0 \text{ pour } l = 1,$$

mais on n'a pas supposé $\langle n \mid L \mid k \mid \rangle = 0$.

Ces conditions ne sont nullement restrictives comme on peut le voir par exemple pour l'onde S ; une transformation $F_{ks}^{L^T S^T} \rightarrow F_{ks}^{L^T S^T} + C_1 P_{1s} + C_2 P_{2s}$ ne change pas le déterminant de Slater puisque l'électron ks a un état angulaire et un état de spin identiques à ceux de l'un quelconque des électrons des couches 1s, 2s et, par suite, par l'antisymétrie du déterminant de Slater la composante de $F_{ks}^{L^T S^T}$ orthogonale à P_{1s}, P_{2s} seule donne une contribution non nulle. Par contre, il n'est pas toujours loisible d'ajouter un multiple de P_{3s} . La transformation $F_{ks}^{L^T S^T} \rightarrow F_{ks}^{L^T S^T} + C_3 P_{3s}$ ne modifie pas le déterminant de Slater si $S^T = 1$ car, dans ce cas, l'électron de valence et l'électron ks ayant même spin la fonction d'onde doit être antisymétrique en r_{11}, r_{12} mais si $S^T = 0$, la fonction d'onde n'a pas besoin d'avoir cette même propriété.

Les équations (23) peuvent être approchées de différentes façons :

L'approximation la plus grossière consiste à découpler ces équations et à annuler les termes intégraux, c'est l'approximation du champ central ;

L'approximation suivante consiste à ne prendre qu'un terme de couplage et à supposer une des ondes couplées peu sensible au couplage ; on prend alors pour

cette onde la solution du champ central que l'on utilise pour résoudre l'équation de l'onde sensible au couplage (méthode « distorted wave » [16]) ;

L'approximation supérieure consiste à résoudre exactement les équations couplées en négligeant toujours les termes intégraux. Cette approximation est certainement bonne pour des énergies suffisamment grandes car la polarisation est « contenue », comme nous l'avons vu, dans les termes de couplage. Quant aux termes d'échange, ils sont certainement négligeables pour les grandes valeurs de l (qui contribuent principalement à la diffusion si l'énergie est grande), car classiquement le paramètre d'impact est alors grand, l'électron de collision s'approche assez peu de l'atome et les phénomènes d'échange — purement quantiques, dus à l'antisymétrie des fonctions d'onde — ont moins de chance de se produire. Mathématiquement, les termes en $(n\ L\ |\ k'\ l')\ P_{n'L'}$ disparaissent dès que L^T est suffisamment grand et, pour les grandes valeurs de L^T , les autres termes d'échange deviennent petits.

Rappelons que les termes intégraux des équations (23) ont une portée limitée, c'est-à-dire qu'ils deviennent nuls lorsque les fonctions radiales deviennent nulles.

Une dernière remarque enfin : les équations (23) ne couplant que des déterminants ayant même L^T et même S^T , on aura alors, si seuls $L = 0$, $L = 1$ sont considérés, comme états couplés :

$$\Gamma_2 = \{ L = 0, l = L^T, k_{3s}; S^T, L^T \}, \Gamma_1 = \{ L = 1, l = L^T - 1, k_{3p}; S^T, L^T \},$$

$$\Gamma_3 = \{ L = 1, l = L^T + 1, k_{3p}; S^T, L^T \}, \Gamma_4 = \{ L = 1, l = L^T, k_{3p}; S^T, L^T \}.$$

Les trois premiers sont effectivement couplés entre eux ; le dernier donne lieu à une équation intégral-différentielle homogène non couplée car la parité n'est pas la même pour cet état que pour les trois premiers (les f_λ lient des états de même parité).

On a posé

$$E = E(3s) + \frac{1}{2} k_{3s}^2, \quad \frac{1}{2} k_{3p}^2 = E(3s) - E(3p) + \frac{1}{2} k_{3s}^2,$$

$E(3s)$ désignant l'énergie de l'atome dans l'état fondamental $3s$, $E(3p)$ désignant l'énergie de l'atome dans l'état excité $3p$.

II. Calcul de la section de choc totale pour le cas où l'électron de la collision a une énergie nulle

Nous allons d'abord traiter le cas où l'électron a une énergie nulle. Cela revient à donner à l'électron de collision un moment angulaire bien déterminé $l = 0$, si l'on développe l'onde plane en ondes sphériques.

Nous avons procédé avant de résoudre les équations intégral-différentielles couplées à plusieurs approximations :

1° approximation du champ central ;

2° approximation de la polarisation à partir du champ central par une méthode similaire à la méthode « distorted wave » (sans échange) ;

3° approximation des effets d'échange — sans polarisation — par un procédé variationnel.

Les approximations 1^o, 2^o, 3^o ne donnant aucun résultat satisfaisant, nous avons :

4^o résolu les équations intégrales-différentielles couplées en négligeant seulement les termes d'échange de l'électron de collision avec le noyau ;

5^o estimé les effets d'échange de l'électron de collision avec le noyau.

1. Approximation du champ central. — Si on néglige dans les équations (23) les termes d'échange et les termes de couplage, on obtient

$$(25) \quad \mathcal{H}_{\text{ch.c.}} F_{\text{ch.c.}} = 0,$$

avec

$$\mathcal{H}_{\text{ch.c.}} = \mathcal{H}^{(1)} + v + \sum_{\lambda} f_{\lambda}(L \ 1, L \ 1 ; L^T) y_{\lambda}(n \ L, n \ L | r) - \frac{1}{2} k_{nL}^2.$$

On a en outre $L = 0, l = 0, L^T = 0$ (énergie nulle).

Cette approximation ne peut donner de bons résultats car dans le cas du sodium, le couplage $3s \rightarrow 3p$ est très fort et d'autre part pour $l = 0$, on a classiquement l'électron qui heurte l'atome : les effets d'échanges sont alors très grands. Avec $L = l = 0$ la seule valeur de λ donnant un f_{λ} non nul est $\lambda = 0$, $f_0(00,00 ; 0) = 1$; par suite on a explicitement

$$(26) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{22}{r} + 4 y_0(1s, 1s | r) + 4 y_0(2s, 2s | r) + \right. \\ \left. + 12 y_0(2p, 2p | r) + 2 y_0(3s, 3s | r) \right] F_1^{\text{ch.c.}} = 0$$

(nous désignerons par F_1 la fonction $F_{K=0, l=0, n=3, L=0}^{L=0, l=0, n=3, L=0}$). Cette équation a été résolue dans [17].

Nous avons utilisé les tables des fonctions P_{nl} dans [15] et calculé par la méthode des trapèzes les fonctions $y_0(P_{nl}, P_{nl} | r)$. L'équation (26), qui est de la forme $y'' = f(x) y$, a été résolue en utilisant la méthode d'intégration numérique de Gauss-Jackson (cf. appendice 1).

On intègre l'équation en partant de la solution régulière de (26) qui a, à l'origine, un développement de la forme $F_1 = \alpha_0 r + \alpha_1 r^2 + \dots$ [l'équation (26) est du type de Fuchs], où α_0 est arbitraire et où $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ sont déterminés par une relation de récurrence en fonction des coefficients du développement en série des fonctions régulières $y_0(n \ l, n \ l | r)$.

Chacune des fonctions $y_0(n \ l, n \ l | r)$ tendant exponentiellement vers $1/r$ on a pour $r \geq r_0$ pratiquement $d^2 F_1^{\text{ch.c.}} / dr^2 \approx 0$. Par suite on aura asymptotiquement $F_1^{\text{ch.c.}} \sim A (r + \Lambda^{\text{ch.c.}})$ dès que $r \geq r_0$ ($r_0 = 14$ rayons atomiques).

Soit alors $G_1(k \ r)$ une solution régulière à l'origine de l'équation

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) + k^2 \right] G_1(k \ r) = 0,$$

$G_1(r) \sim \sin[k \ r - (l \ \pi/2) - \gamma_1(k)]$, γ_1 est le déphasage. En utilisant les matrices R et S introduites dans le chapitre I (ici ces matrices sont diagonales), $R_1 = \text{tg } \gamma_1$, $S_1 = \exp(2 i \ \gamma_1)$. Pour $l = 0$ on peut écrire

$$G_0(r) \sim \frac{1}{k} \sin k \ r + \frac{R_1}{k} \cos k \ r ;$$

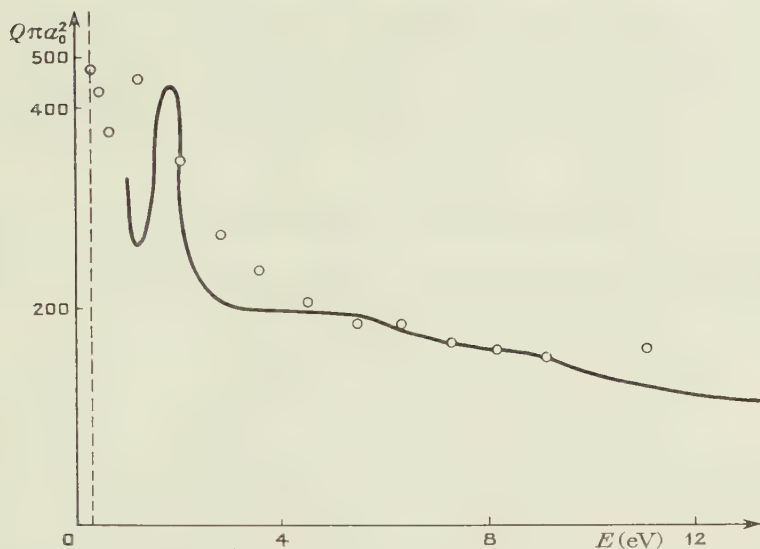


FIG. 3. — Section de choc totale pour le sodium : $\circ$ expériences récentes [19] ; — expériences de Bode [18].

si $k \rightarrow 0$, $G_0 \rightarrow r + \Lambda$, où $\Lambda = \lim_{k \rightarrow 0} (R_1/k)$, Λ est la longueur de diffusion.

Dans la forme asymptotique de $F_1^{\text{ch.c.}}$, Λ est une constante sans signification physique. La détermination de $\Lambda^{\text{ch.c.}}$ donne $\Lambda^{\text{ch.c.}} = 2,36$. La section totale étant, pour $k \neq 0$ [16],

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \tau_l$$

on a, lorsque $k \rightarrow 0$, $Q \rightarrow 4\pi\Lambda^2 a_0^2$ et on trouve, par conséquent, $Q_{(k \rightarrow 0)}^{\text{ch.c.}} = 22\pi a_0^2$. Cette valeur, comme il fallait s'y attendre, est en désaccord avec les données expérimentales (fig. 3).

2. Estimation de la polarisation (sans échange). — Nous poserons, pour simplifier l'écriture, $F_1 = F_{30k_0}^{\text{LTS}^T}$, $F_2 = F_{31k_1}^{\text{LTS}^T}$, $E_1 = E_{30}$, $E_2 = E_{31}$, $k_1^2 = k_{3s}^2$, $k_2^2 = k_{3p}^2 = 2(E_1 - E_2) + k_1^2$. Asymptotiquement les équations (23) s'écrivent (pour $L^T = 0$)

$$(27) \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 \right) F_1 = -\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{S_{12}}{r^2} F_2, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + k_2^2 \right) F_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{S_{12}}{r^2} F_1,$$

dès que $r \geq r_0 \geq 24 a_0$, en négligeant les termes en $1/r^3$.

$$S_{12} = \int_0^\infty P_{3s} P_{3p} r dr, \quad f_1(00,11; 0) = -1/\sqrt{3}, \quad k_1 = 0, \quad k_2^2 = -0,142,$$

les termes de couplage, comme on l'a vu, donnant le potentiel de polarisation.

Nous avons voulu voir quelle était l'importance de ce couplage par rapport au champ central simple et pour cela nous avons procédé de la façon suivante.

Avec la solution $F_1^{\text{ch.c.}}$ nous avons résolu l'équation

$$(28) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + V_2(r) + k_2^2 \right] F_2^{e.p.} = - \frac{2}{\sqrt{3}} y_1(3s, 3p | r) F_1^{ch.c.},$$

où $V_2 = -2v - 2y_0(3p, 3p | r) + (22/r)$. Puis, avec la solution $F_2^{e.p.}$ ainsi obtenue, nous avons résolu à nouveau l'équation de F_1 (en prenant les mêmes conditions aux limites) :

$$(29) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) \right] F_1^{e.p.} = - \frac{2}{\sqrt{3}} y_1(3s, 3p | r) F_2^{e.p.}.$$

Si nous répétons ce processus, nous arriverions après un certain nombre d'interactions à la solution exacte du système d'équations couplées

$$(30) \quad \begin{cases} \left[\frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) \right] F_1 = - \frac{2}{\sqrt{3}} y_1(3s, 3p | r) F_2, \\ \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + V_2(r) + k_2^2 \right] F_2 = - \frac{2}{\sqrt{3}} y_1(3s, 3p | r) F_1, \end{cases}$$

où $V_1 = (22/r) - 2v - 2y_0(3s, 3s | r)$.

La fonction P_{3p} nécessaire au calcul de $y_1(3s, 3p | r)$ a été prise dans [14] ainsi que E_2 . Par contre E_1 a été pris dans [15]. La valeur de k_2^2 ainsi obtenue est $k_2^2 = -0,142$ ($k_1 = 0$). Cette valeur diffère très peu de la valeur expérimentale $k_{exp}^2 = 0,144$.

Les fonctions $F_1^{e.p.}$ et $F_2^{e.p.}$ sont régulières à l'origine. A l'infini, on doit prendre la solution de (28) tendant vers 0 ; alors on a $F_1^{e.p.} \sim A(r + \lambda^{e.p.})$ et on aura, comme au paragraphe II.4, $Q^{e.p.} = 4\pi (\Lambda^{e.p.})^2 a_0^2$.

La méthode d'intégration numérique adoptée a été encore celle de Gauss-Jackson. Du point de vue du calcul numérique il s'introduit une difficulté due à la présence d'une exponentielle croissante dans (28), la solution générale, régulière à l'origine, de (28) étant asymptotiquement

$$C_1 \exp(|K_2| r) + C_2 \exp(-|K_1| r) + O(1/r).$$

Par suite le terme, physiquement sans signification, $\exp(-|K_2| r)$ risque de rendre imprécise la détermination des termes bornés pour r grand. On pourrait alors imaginer d'intégrer « à l'envers », c'est-à-dire partir de r_0 grand avec une fonction ayant une forme asymptotique bornée à l'infini et intégrer de r_0 vers l'origine. Là encore, la présence de la solution irrégulière à l'origine, divergeant comme $1/r^2$ va rendre imprécise la détermination de la solution régulière se comportant comme r^2 .

La méthode à adopter pour éviter ce double inconvénient consiste à calculer un couple de fonctions, régulières à l'origine, $\hat{F}_2^{e.p.}$, $\hat{F}_2^{ch.c.}$ et un couple de fonctions bornées à l'infini, $\mathcal{F}_2^{e.p.}$, $\mathcal{F}_2^{ch.c.}$, les F étant calculées de zéro à l'infini et les $\mathcal{F}$ de l'infini vers l'origine et à les raccorder en deux points. On prend comme couple de fonctions une solution de l'équation homogène de (28) et une solution de l'équation non homogène. Si $F_2^{e.p.}$ désigne la solution bornée à l'origine et nulle à l'infini, on aura

$$\begin{aligned} F_2^{e.p.} &= \hat{F}_2^{e.p.} + \gamma_1 \hat{F}_2^{ch.c.} = \mathcal{F}_2^{e.p.} + \gamma_2 \mathcal{F}_2^{ch.c.}, \\ F_2^{ch.c.} &= F_2^{e.p.} + \gamma_1 F_2^{ch.c.} = \mathcal{F}_2^{e.p.} + \gamma_2 \mathcal{F}_2^{ch.c.}. \end{aligned}$$

Les solutions de (30) admettent un développement asymptotique de la forme

$$(31) \quad \begin{cases} F_1 \sim A \left[r + \Lambda - 2 \frac{S_{12}^2}{3 k_2^2} \left(\frac{1}{r} + \frac{3 \lambda}{2 r^2} - \frac{S_{12}^2}{9 k_2^2 r^3} + \dots \right) \right], \\ F_2 \sim A \left[\frac{2 S_{12}}{\sqrt{3} k_2^2} \left(\frac{1}{r} + \frac{\lambda}{r^2} - \frac{2 S_{12}^2}{3 k_2^2 r^3} + \dots \right) \right], \end{cases}$$

A étant une constante arbitraire. Par conséquent, on déterminera $\Lambda^{e.p.}$ et $F_{1,2}^{e.p.}$ en écrivant

$$\begin{aligned} F_2^{e.p.} &\sim A \left[\frac{2 S_{12}}{\sqrt{3} k_2^2} \left(\frac{1}{r} + \frac{\Lambda^{ch.c.}}{r^2} - \dots \right) \right], \\ F_1^{e.p.} &\sim A \left[r + \Lambda^{e.p.} - 2 \frac{S_{12}^2}{3 k_2^2} \left(\frac{1}{r} + 3 \frac{\Lambda^{e.p.}}{2 r^2} - \dots \right) \right]. \end{aligned}$$

Le calcul donne alors $\Lambda^{e.p.} = -36$ ce qui, comparé à $\Lambda^{ch.c.} = 2,36$, montre que l'effet de la polarisation est très grand. La correction est tellement grande que le résultat ne peut être physiquement significatif.

3. Estimation de l'échange (sans polarisation). — L'examen des équations du paragraphe I.5.3 montre que l'effet d'échange — sans polarisation — est lié aux produits scalaires $(P_{3s} | F_1)$ et $(P_{3p} | F_2)$. Si nous négligeons le couplage, l'échange ne sera plus représenté que par $(P_{3s} | F_1)$. Par suite, on peut chercher à améliorer, du point de vue variationnel, la fonction $F_1^{ch.c.}$ en prenant des fonctions d'essais de la forme

$$(32) \quad \begin{aligned} F_1^e &= F_1^{ch.c.} + C P_{3s} = F_{\alpha_1} + (F_1^{ch.c.} | 1s) P_{1s} + (F_1^{ch.c.} | 2s) P_{2s} + \\ &\quad + (F_1^{ch.c.} | 3s) P_{3s} + C P_{3s}, \\ F_2 &\equiv 0. \end{aligned}$$

Evaluons alors

$$L = \langle 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s, F_1^e; S^T, L^T = 0 | H(12) - E | 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s, F_1^e; S^T, 0 \rangle.$$

Comme la fonction d'onde est antisymétrique, on peut ignorer les termes en P_{1s} et P_{2s} et ne faire le calcul de L qu'avec $F_{\alpha_1} + C P_{3s}$:

$$\begin{aligned} L(C) &= \langle 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s, \alpha_1; S^T, 0 | H(12) - E | 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s, \alpha_1; S^T, 0 \rangle + \\ &\quad - 2 C \langle 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2; S^T, 0 | H(12) - E | 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s, \alpha_1; S^T, 0 \rangle + \\ &\quad + C^2 \langle 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2; S^T, 0 | H(12) - E | 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2; S^T, 0 \rangle. \end{aligned}$$

Ces éléments de matrice entrent dans le cadre de celui plus général calculé dans le paragraphe I.5.3 (il ne faut considérer dans le paragraphe I.5.3 que les termes diagonaux et les termes de couplage doivent être annulés) et on obtient alors

$$(33) \quad \begin{aligned} L(C) &= \langle \alpha_1 | H(1) + v - \frac{1}{2} k_1^2 | \alpha_1 \rangle + (-1)^{S^T} R_0(3s, 3s, \alpha_1, \alpha_1) - \\ &\quad - R_0(1s, 1s, \alpha_1, \alpha_1) - R_0(2s, 2s, \alpha_1, \alpha_1) - R_1(2p, 2p, \alpha_1, \alpha_1) + \\ &\quad - C [1 + (-1)^{S^T}] \{ 2 R_0(3s, \alpha_1, 3s, \alpha_1) + C [R_0(3s, 3s, 3s, 3s) + E_1 - \frac{1}{2} k_1^2] \}. \end{aligned}$$

L'évaluation de $\langle \alpha_1 | H(1) + v - \frac{1}{2} k_1^2 | \alpha_1 \rangle$ se fait simplement en remarquant que

$[H(1) + v + y_0(3s, 3s) - \frac{1}{2} k_1^2] F_1^{\text{ch.c.}} = 0$, $F_1^{\text{ch.c.}} = F_{\alpha_1} + (F_1 | P_{1s}) P_{1s} + \dots$ et, par suite, on est ramené à calculer $H(1) P_{ns}$ ($n = 1, 2$) qui se déduit des équations des fonctions radiales du sodium (§ 1.5.1 et 2) et, par conséquent, il suffit numériquement de calculer les composantes de $F_1^{\text{ch.c.}}$ selon P_{1s} , P_{2s} , P_{3s} pour calculer cet élément :

$\langle F_1^{\text{ch.c.}} | 1s \rangle = 0,026$, $\langle F_1^{\text{ch.c.}} | 2s \rangle = 0,886$, $\langle F_1^{\text{ch.c.}} | 3s \rangle = 19,5$ (ces intégrales sont calculées par la méthode des trapèzes). Si nous négligeons les termes faisant intervenir P_{1s} et P_{2s} , ce qui est légitime étant données les composantes petites de $F_1^{\text{ch.c.}}$ sur P_{1s} et P_{2s} , on obtient une expression simplifiée de $L(C)$:

$$(34) \quad L(C) = \langle F_1^{\text{ch.c.}} | 3s^2 \rangle [E_1 - \frac{1}{2} k_1^2 - R_0(3s, 3s, 3s, 3s)] + (-1)^{S^T} R_0(3s, 3s, \alpha_1, \alpha_1) \{1 - (-1)^{S^T}\} C + 2 R_0(3s, 3s, \alpha_1, \alpha_1) + C [E_1 - \frac{1}{2} k_1^2 + R_0(3s, 3s, 3s, 3s)] \}.$$

Pour $S^T = 1$, comme il fallait s'y attendre, $F_1^{\text{ch.c.}}$ n'est pas améliorable puisque la fonction d'onde est insensible à $C P_{3s}$ et, par suite, on ne peut appliquer que l'équation (11) qui donne ($k_1 = 0$)

$$(35) \quad (\Lambda^{S^T})^a = \Lambda^{\text{ch.c.}} - 2 L(S^T = 1) = -29.$$

Pour $S^T = 0$, $F_1^{\text{ch.c.}}$ est « améliorable » et on peut utiliser (7) qui, pour $k_1 \rightarrow 0$, donne $\Delta[\Lambda^e - L(C)] = 0$. Comme Λ^e ne dépend pas de C (puisque la transformation $F \rightarrow F + C P_{3s}$ ne change pas Λ , $\Lambda^e = \Lambda^{\text{ch.c.}}$) on a simplement $\Delta[L(C)] = 0$ ce qui donne

$$C_1 = -R_0(3s, 3s, 3s, \alpha_1) / [R_0(3s, 3s, 3s, 3s) + E_1].$$

On obtient numériquement $R_0(3s, 3s, 3s, 3s) = F_0(3s, 3s) = 0,216$ et $R_0(3s, 3s, 3s, \alpha_1) = -0,896$, $E_1 = -0,180_5$, $E_2 = -0,109_4$. La valeur de C étant calculée, on applique alors (11) qui donne $(\Lambda^{S^T=0})^a = \Lambda^{\text{ch.c.}} - 2 L(C_1)$. On obtient ainsi $(\Lambda^{S^T=0})^a = 60$. Là encore, la correction est trop grande pour être significative.

4. Traitement du problème avec inclusion de la polarisation et de l'échange. —

Nous avons vu que le champ central n'était pas un modèle adéquat pour rendre compte de la section de choc très grande pour de faibles énergies. Nous avons vu aussi que les corrections faites à partir du champ central pour estimer la polarisation d'une part, l'échange d'autre part, sont très grandes et du même ordre de grandeur. Il est donc impossible de traiter l'un de ces deux derniers effets comme une perturbation par rapport à l'autre et il nous faut donc résoudre les équations intégral-différentielles couplées introduites dans le paragraphe 1.5.3.

Il nous a paru légitime de négliger tout d'abord les termes d'échange entre l'électron de collision et les électrons des couches fermées. Nous avons vérifié a posteriori qu'une telle hypothèse était valable, l'estimation que nous avons faite ensuite de ces termes d'échange ayant montré qu'ils affectaient peu la section de choc ainsi obtenue.

Dans une telle approximation, les équations (23) s'écrivent ($L^T = 0$)

$$(36) \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) + k_1^2 \right] F_1^{S^T} = (-1)^{S^T} [(2 E_1 - k_1^2) \langle F_1^{S^T} | P_{3s} \rangle + \\ & \quad + 2 y_0(3s, F_1^{S^T} | r)] P_{3s}(r) - \frac{2}{\sqrt{3}} [y_1(3s, 3p | r) F_2^{S^T} + \\ & \quad + (-1)^{S^T} y_1(3s, F_2^{S^T} | r) P_{3p}(r)], \\ & \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + V_2(r) + k_2^2 \right] F_2^{S^T} = (-1)^{S^T} [(2 E_2 - k_2^2) \langle F_2^{S^T} | P_{3p} \rangle + \\ & \quad + 2 y_0(3p, F_2^{S^T} | r) P_{3s}(r)] - \frac{2}{\sqrt{3}} [y_1(3s, 3p | r) F_1^{S^T} + \\ & \quad + (-1)^{S^T} y_1(3p, F_1^{S^T} | r) P_{3s}(r)]. \end{aligned} \right.$$

(Nous avons en outre négligé des termes se comportant comme $1/r^3 F$ ou $1/r^3 P$ à l'infini.)

$$k_1^2 = 0, \quad k_2^2 = 0,142, \quad E_1 = -0,1805, \quad E_2 = -0,1094,$$

$$V_1 = (22/r) - 2v - 2y_0(3s, 3s | r), \quad V_2 = (22/r) - 2v - 2y_0(3p, 3p | r),$$

$$v = 4y_0(1s, 1s | r) + 4y_0(2s, 2s | r) + 12y_0(2p, 2p | r).$$

Asymptotiquement ces équations sont identiques à (30) et, par conséquent, les développements (31) seront valables. Notons toutefois que l'on aura, dans ces

équations asymptotiques, $\frac{S_{12}}{r^2}$ au lieu de $y_1(3s, 3p | r)$ avec $S_{12} = \int_0^\infty P_{3s} P_{3p} r dr$.

Ces équations ont été résolues par itérations successives dans chacun des deux cas $S^T = 0$, $S^T = 1$:

$$(37a) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) \right] F_1^{S^T(n)} = (-1)^{S^T} [2 E_1 \langle F_1^{S^T(n-1)} | P_{3s} \rangle + \\ + 2 y_0(3s, F_1^{S^T(n-1)} | r)] P_{3s} - \frac{2}{\sqrt{3}} [y_1(3s, 3p | r) F_2^{S^T(n-1)} + \\ + (-1)^{S^T} y_1(3s, F_2^{S^T(n-1)} | r) P_{3p}],$$

$$(37b) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + V_2(r) + k_2^2 \right] F_2^{S^T(n)} = \\ = (-1)^{S^T} [(2 E_2 - k_2^2) \langle F_2^{S^T(n-1)} | P_{3p} \rangle + 2 y_0(3p, F_2^{S^T(n-1)} | r)] P_{3p} - \\ - \frac{2}{\sqrt{3}} [y_1(3s, 3p | r) F_1^{S^T(n-1)} + (-1)^{S^T} y_1(3p, F_1^{S^T(n-1)} | r) P_{3s}],$$

avec, pour les deux cas, comme approximation 0 les fonctions de l'approximation du champ central, c'est-à-dire les solutions des équations obtenues en annulant le second membre.

A chaque itération nous avons ainsi une équation différentielle non homogène. Les solutions sont déterminées par $F_1(0) = F_2(0) = 0$, la seconde condition étant

arbitraire $\lim_{r \rightarrow 0} \frac{F_1^{(n)}(0)}{r} = \text{Cte}$, $\lim_{r \rightarrow \infty} F_2^{(n)} = 0$. Comme dans le cas de l'estimation

de la polarisation, $F_2^{(n)}$ doit être intégré deux fois, de l'origine vers l'infini et de l'infini vers l'origine (en fait la deuxième solution est fournie dans les deux cas par la résolution de l'équation homogène) et ces couples de solutions sont raccordés comme dans le paragraphe II.2.

Les formes asymptotiques (31) servant tant au calcul de la longueur de diffusion qu'à imposer la condition $\lim_{r \rightarrow \infty} F_2^{(n)}(r) = 0$ sont valables dès que $r > 22 a_0$.

Pour $S^T = 0$, la longueur de diffusion converge rapidement et régulièrement ; il n'en est pas de même pour le cas $S^T = 1$ où Λ converge vers deux limites ; nous avons une situation identique pour l'hydrogène [20] : dans les deux cas, la convergence des fonctions n'est pas bonne. Si $F_1^{(n)} \rightarrow \vec{F}_1$, $F_1^{(n+1)} \rightarrow \vec{G}_1$ ($i = 1, 2$) on peut écrire $\mathcal{L}[\vec{F}] = \Phi[\vec{G}]$ et $\mathcal{L}[\vec{G}] = \Phi[\vec{F}]$, $\mathcal{L}$ désignant un opérateur différentiel et Φ un opérateur intégral. Il en résultera que l'on aura $\mathcal{L}[\vec{F} + \vec{G}] = \Phi[\vec{F} + \vec{G}]$ et, par suite, on peut prendre comme limite de la longueur de diffusion la moyenne des deux limites. On a alors les résultats suivants :

n	0	1	2	3	4	f
$\Lambda^{S^T=0}$	2,4	— 10	— 14	— 13,9	—	— 14
$\Lambda^{S^T=1}$	2,4	9,6	5,3	9,5	6,6	+ 8

n désignant dans chacun des cas le numéro de l'itération, la colonne f donnant les résultats finaux.

La section de choc élastique étant

$$Q^{el} = \frac{\pi}{4 k_1^2} \sum_l (2l + 1) (\sin^2 \delta^{S^T=0} + 3 \sin^2 \delta^{S^T=1})$$

on a, pour $k_1 \rightarrow 0$, $Q^{el} = \pi [(\Lambda^{S^T=0})^2 + 3 (\Lambda^{S^T=1})^2]$; on obtient alors $Q^{el} = 390 \pi a_0^2$ (fig. 4).

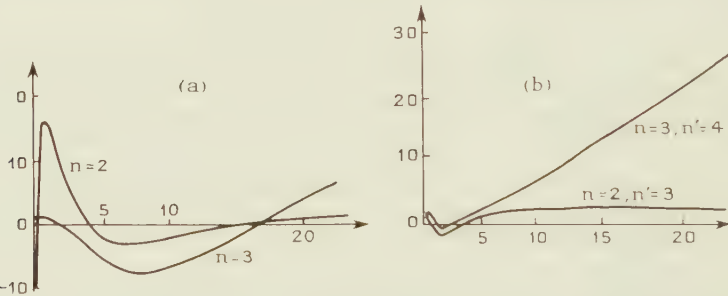


FIG. 4. — Fonctions radiales F_1 : a) $F_1^{0(n)}(S^T = 0)$, b) $F_1^{(n+n')/2}(S^T = 1) = \frac{1}{2} F_1^{(n)} + F_1^{(n')}(S^T = 1)$.

5. **Correction d'orthogonalité, échange avec le noyau de l'atome.** — Les résultats donnés ci-dessus ne tiennent pas compte de l'échange de l'électron de collision avec les couches profondes. D'autre part, les fonctions d'onde F_1, F_2 ne sont pas orthogonales aux fonctions radiales P_{1s}, P_{2s}, P_{2p} .

Considérons simplement l'onde s, c'est-à-dire la fonction F_1 . Représentons par $\mathcal{L}F_1$ le premier membre de l'équation (37a). Les équations complètes contiennent, d'après le paragraphe 1.5.3, des termes supplémentaires tels que $y_0(P_{1s}, F_1) P_{1s}, y_0(P_{2s}, F_1) P_{2s}$. On aurait dû alors à chaque itération résoudre en outre $\mathcal{L}F_1^{(n)} = y_0(P_{1s}, F_1^{(n-1)}) P_{1s} + \lambda^{(n)} P_{1s}, \lambda^{(n)}$ étant choisi de façon que $(P_{1s}, F_1^{(n)}) = 0$ en remplaçant $F^{(n)}$ par $F^{(n)} + U^{(n)}$. L'itération 1 à partir des fonctions $F_1^{(0)}$ prudemment obtenues consiste donc à écrire

$\mathfrak{L}F_1^{(1)} = \lambda^{(1)}F_1^{(0)}$, $F_1^{(0)}$ étant égale à $F_1^{S^T=0}$ ou $F_1^{S^T=1}$. $\lambda^{(1)}$ joue alors le rôle d'une valeur moyenne de $y_1(1s, F_1)$. On a donc résolu l'équation $\mathfrak{L}U = P_{ns}$ ($n = 2$), on a remplacé dans les solutions précédentes F_1 par $F_1 + \lambda U$ et on a choisi λ de façon à assurer l'orthogonalité. La correction n'a pas été faite pour $n = 1$, car on avait déjà pratiquement l'orthogonalité. Les fonctions $F_1^{S^T}$ ainsi obtenues sont très différentes des précédentes, néanmoins la longueur de diffusion est pratiquement inchangée : $\Lambda^{S^T=0} = -12$, $\Lambda^{S^T=1} = +9$, $Q^{e1} = 380 \pi a_0^2$.

6. Conclusion. — La section élastique obtenue est de l'ordre de $400 \pi a_0^2$, elle paraît ainsi être de l'ordre de grandeur de celle que donnerait une extrapolation de données expérimentales [19].

D'autre part, des mesures de section d'échange faites pour des électrons de basse énergie [21] montrent que la section d'échange doit être supérieure à $260 \pi a_0^2$ (la section d'échange mesure le nombre total d'électrons diffusés ayant échangé leur spin avec celui de l'atome).

Dans la représentation γ une telle section serait donnée par le module de l'élément de la matrice T : $T(m s = 1/2, m s' = -1/2, m s = -1/2, m s = +1/2)$:

$$\begin{aligned} Q^{\text{éch}} &= \frac{\pi}{k_1^2} \sum_1 (2l+1) \left| T_1 \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right) \right|^2 \\ &= \frac{\pi}{k_1^2} \sum_1 (2l+1) \sin^2 (\delta^{S^T=0} - \delta^{S^T=1}), \\ Q^{\text{éch}} &\xrightarrow{k_1 \rightarrow 0} |\Lambda^{S^T=0} - \Lambda^{S^T=1}|^2 \pi a_0^2 \simeq 440 \pi a_0^2. \end{aligned}$$

Toutefois, il était suggéré dans [21] que du fait de l'existence d'un état lié Na^- (d'énergie de liaison presque nulle) la contribution de l'état singulet devait largement dominer celle du triplet. Ce n'est pas ce que nos calculs montrent ; les deux contributions sont à peu près du même ordre de grandeur.

III. Calcul des sections de choc au voisinage supérieur immédiat de l'énergie correspondant au seuil de la transition $3s \rightarrow 3p$ du sodium

La courbe de la section totale en fonction de l'énergie révèle la présence d'un maximum relatif très accentué (fig. 3) lorsque l'énergie de l'électron incident est voisine de celle qui permet à l'atome d'effectuer la transition $3s \rightarrow 3p$.

Nous avons donc calculé les sections élastiques et inélastiques dans ce voisinage, l'énergie de l'électron étant toujours supérieure à l'énergie du seuil d'excitation de la transition $3s \rightarrow 3p$ et les résultats obtenus montrent bien l'existence d'un maximum pour la section élastique ; toutefois ce maximum est nettement moins accentué que celui que l'on obtient expérimentalement ; la raison en est, très probablement, que l'hypothèse que nous avons faite en négligeant les phénomènes d'échange n'est pas justifiée.

1. Résolution des équations couplées au voisinage du seuil $3s \rightarrow 3p$. Calcul des sections de choc. — Il nous faut maintenant tenir compte de plusieurs valeurs

du moment angulaire pour l'électron incident. Si son énergie est faible, $L^T = 0$ et $L^T = 1, 2, 3, 4, 5$ suffisent mais plus l'énergie de l'électron augmente plus on doit alors considérer de valeurs de L^T . Si l'énergie est suffisamment grande, on peut négliger l'échange. Les équations (23) deviennent alors, si on néglige l'échange ($L^T \neq 0$),

$$(38) \quad \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} - 2v - 2v_1 + k_1^2 \right] F_1 = 2v_{12} F_2 + 2v_{13} F_3, \\ & \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_2(l_2+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} - 2v - 2v_2 + k_2^2 \right] F_2 = 2v_{21} F_1 + 2v_{23} F_3, \\ & \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_3(l_3+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} - 2v - 2v_3 + k_3^2 \right] F_3 = 2v_{31} F_1 + 2v_{32} F_2, \\ & \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_4(l_4+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} - 2v - 2v_4 + k_4^2 \right] F_4 = 0, \end{aligned} \right.$$

où l'on a posé $F_1 = F_{31}^{L^T}, k_{3p}, L^T = 1, F_2 = F_{30}^{L^T}, k_{3s}, L^T, F_3 = F_{31}^{L^T}, k_{3p}, L^T = 1, F_4 = F_{31}^{L^T}, k_{3p}, L^T$, par conséquent, $l_1 = L^T - 1, k_1 = k_{3p}, l_2 = L^T, k_2 = k_{3s}, l_3 = L^T + 1, k_3 = k_{3p}, l_4 = L^T, k_4 = k_{3p}$,

$$(39) \quad \left\{ \begin{aligned} v &= 2y_0(1s, 1s | r) + 2y_0(2s, 2s | r) + 6y_0(2p, 2p | r), \\ v_1 &= y_0(3p, 3p | r) + \frac{L^T - 1}{5(2L^T + 1)} y_2(3p, 3p | r), \\ v_2 &= y_0(3s, 3s | r), \\ v_3 &= y_0(3p, 3p | r) + \frac{L^T - 2}{5(2L^T + 1)} y_2(3p, 3p | r), \\ v_4 &= y_0(3p, 3p | r) - (1/5) y_2(3p, 3p | r), \\ v_{12} = v_{21} &= \left[\frac{L^T}{3(2L^T + 1)} \right]^{1/2} y_1(3s, 3p | r), \\ v_{13} = v_{31} &= -\frac{3}{5(2L^T + 1)} [L^T(L^T + 1)]^{1/2} y_1(3p, 3p | r), \\ v_{23} = v_{32} &= -\left[\frac{L^T}{3(2L^T + 1)} \right]^{1/2} y_1(3s, 3p | r). \end{aligned} \right.$$

Les coefficients $f_\lambda(L, L', l'; L^T)$ ont été explicités; ils sont donnés dans [1]. Pour $L^T = 0$, on n'obtient que deux équations couplées F_2 et F_3 . Les spins n'interviennent plus, car ils n'entrent dans les équations que par l'intermédiaire des termes d'échange.

Ces équations ont été résolues pour des valeurs de l'énergie pour lesquelles on avait $k_i^2 > 0$ pour $i = 1, 2, 3, 4$. Les solutions sont alors toutes bornées à l'infini.

L'intégration numérique a été faite selon la méthode de Runge-Kutta (appendice 1). On a déterminé numériquement la solution générale, régulière à l'origine, en intégrant trois fois le système des trois équations couplées avec des conditions arbitraires sur les dérivées à l'origine.

Les fonctions du système (39) se comportant à l'origine comme

$r^{L^T + \varepsilon + 1}$ ($\varepsilon = -1, 0, +1$) il peut se produire alors que, pour L^T assez grand, la détermination précise des solutions régulières devienne difficile, près de l'origine, car les calculs étant faits sur des fonctions qui varient très rapidement il faudrait prendre alors un intervalle d'intégration très petit. Pour éviter ces difficultés, il est préférable de faire un changement de fonction et poser $G_i = F_i/r^{L^T + 1}$. Les fonctions G_i sont alors des fonctions variant lentement près de l'origine.

On a ainsi résolu les équations en G_i pour $0 \leq r \leq 1$ et les équations (39) pour $r > 1$.

Détermination des sections de choc. — Les solutions numériques F_{ij} , étant déterminées par des conditions initiales arbitraires (exception faite de la régularité à l'origine), seront asymptotiquement de la forme

$$(40) \quad F_{ij} \sim A_{ij} \sin(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi) + B_{ij} \cos(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi),$$

$i = 1, 2, 3$ désignant l'une des fonctions F_i du système, l'indice j ($j = 1, 2, 3$) repérant un système de solutions de (39) (pour la détermination des matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$, voir l'appendice 2).

Il nous reste maintenant à montrer comment, à partir des matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$, on peut déterminer les matrices $\mathbf{R}$ et $\mathbf{S}$ définies dans le paragraphe 1.2.

En termes de matrice $\mathbf{R}$ ou $\mathbf{S}$, on aurait

$$(41) \quad \begin{cases} F_{ij}^R \sim k_i^{-1/2} [\sin(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi) \delta_{ij} + \cos(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi) R_{ij}], \\ F_{ij}^S \sim k_i^{-1/2} \{ \exp[-i(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi)] \delta_{ij} - \exp[+i(k_i r - \tfrac{1}{2} l_i \pi)] S_{ij} \}. \end{cases}$$

Si on écrit (40) et (41) sous forme matricielle, on aura, en désignant par $\sin(kr - \tfrac{1}{2} l \pi)$, $\cos(kr - \tfrac{1}{2} l \pi)$, $\exp[\pm i(kr - \tfrac{1}{2} l \pi)]$ des matrices-lignes et par k une matrice diagonale,

$$\begin{aligned} F &\sim \sin(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) \mathbf{A} + \cos(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) \mathbf{B}, \\ F^R &\sim k^{-1/2} [\sin(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) + \cos(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) \mathbf{R}], \\ F^S &\sim k^{-1/2} \{ \exp[-i(kr - \tfrac{1}{2} l \pi)] - \exp[+i(kr - \tfrac{1}{2} l \pi)] \mathbf{S} \}. \end{aligned}$$

Par suite, on aura asymptotiquement

$$F \mathbf{A}^{-1} k^{-1/2} = \sin(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) + \cos(kr - \tfrac{1}{2} l \pi) \mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} k^{-1/2} = F^R$$

et, par conséquent, $\mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} k^{-1/2} = k^{-1/2} \mathbf{R}$,

$$(42) \quad \mathbf{R} = k^{1/2} \mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} k^{-1/2}.$$

Comme $\mathbf{S} = (1 + i\mathbf{R})/(1 - i\mathbf{R})$ on en déduit immédiatement $\mathbf{S}$ puis $\mathbf{T}$ et enfin les sections de choc :

$$(43) \quad \left\{ \begin{aligned} Q^{el}(3s \rightarrow 3s) &= \frac{\pi}{k_{3s}^2} \sum_{L^T} |T_{3s, L^T; 3s, L^T}^{L^T}|^2 (2L^T + 1) = \sum_{L^T} Q_{el}^{(L^T)}, \\ Q^{inel}(3s \rightarrow 3p) &= \sum_{L^T} Q_{inel}^{(L^T)} \\ &= \frac{\pi}{k_{3s}^2} \sum_{L^T} [|T_{3p, L^T-1; 3s, L^T}^{L^T}|^2 + |T_{3p, L^T+1; 3s, L^T}^{L^T}|^2] (2L^T + 1). \end{aligned} \right.$$

Nous avons comparé ces sections de choc $Q^{e.c.}$ aux sections de choc calculées par

la méthode de Born $Q_{\text{el}}^{\text{BLT}}$, $Q_{\text{inel}}^{\text{BLT}}$ (pour la détermination des sections partielles de Born, cf. appendice 3) pour les valeurs suivantes de l'énergie : $k_{3s}^2 = 0,150$; 0,160 8 ; 0,179 3 ; 0,3 ; 0,4 ; 0,6 ; 1,0 (tableaux I et II).

TABLEAU I. — Sections élastiques partielles Q^L ($3s \rightarrow 3s$)

$k_{3s}^2 \backslash L^T$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0,15 B	23,08	3,14	0,41	0,00	—	—	—	—	—	—	—
0,15 é.c.	2,45	4,11	41,62	12,65	×						
0,160 8 B	21,63	2,18	1,89	0,04	—	—	—	—	—	—	—
0,160 8 é.c.	1,99 2,01 —	3,08 2,99 2,99	41,30 41,03 —	14,08	4,03	1,53					
0,179 3 B	19,53	1,07	5,24	0,37	0,01	—	—	—	—	—	—
0,179 3 é.c.	1,41 1,43 —	2,08 2,08 2,08	37,00 37,09 —	15,97	4,86	1,79	0,77	0,37			
0,300 B	11,92	2,77	6,68	4,92	1,71	0,46	0,11	0,03	0,01	—	—
0,300 é.c.	0,05 0,06 —	0,72 0,70 —	16,20 15,80 15,80	13,48	6,72	3,15	1,52	0,78			
0,400 B	9,00	4,43	3,28	4,68	2,69	1,17	0,45	0,17	0,06	0,02	0,01
0,400 é.c.	0,17 0,19 —	0,54 0,53 —	10,16 9,97 —	7,87	— 5,67 5,66	3,18	1,74	0,98			

Dans certaines cases de ces tableaux figurent trois nombres : le premier est le résultat calculé sur machine I. B. M. 650, en utilisant la méthode d'intégration de Gauss-Jackson, les deux autres sont les résultats calculés sur machine I. B. M. 704, en utilisant la méthode de Runge-Kutta mais pour lesquels le calcul des matrices B et A a été fait pour deux valeurs différentes de r ($r = 50 a_0$, $r = 40 a_0$). Enfin, certains chiffres sont accompagnés d'un astérisque : ces nombres ne sont pas les valeurs effectivement calculées mais des valeurs supposées de sections inélastiques partielles (appendice 3) trouvées en utilisant $Q_{s,p}^{\text{LT},1} Q_{s,p}^{\text{LT},r} = (k_p/k_s)^2$.

Nous avons représenté (fig. 5 et 6) les courbes des sections élastiques et inélastiques en les comparant aux courbes expérimentales et à celles que l'on obtient par la méthode de Born.

Le maximum relatif de la section élastique au voisinage de l'énergie d'excitation de la transition $3s \rightarrow 3p$ est nettement sous-estimé par rapport à la courbe

DIFFUSION D'ÉLECTRONS PAR DES ATOMES DE SODIUM

 TABLEAU II. — Sections inélastiques partielles $Q^{LT}(3s \rightarrow 3p)$

k_{3s}^2	L^T	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
0,15	B	0,00	12,43	5,45	0,37	0,02	—	—	—	—	—	—	—	—	—
0,15	é.c.	0,01	12,08	1,79	0,15	0,8*	—*	—	—	—	—	—	—	—	—
0,160 8	B	0,00	9,94	12,87	2,25	0,28	0,03	—	—	—	—	—	—	—	—
0,160 8	é.c.	0,06 0,03 —	12,60 11,39 11,39	6,08 5,09 —	— 1,09 —	0,15 — —	0,02 — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —
0,179 3	B	0,01	7,28	18,82	7,11	1,67	0,35	0,07	0,02	—	—	—	—	—	—
0,179 3	é.c.	0,09 0,10 —	9,55 9,57 —	9,72 9,54 9,57	— 3,82 —	— 0,95 —	— 0,23 —	— 0,05 —	— 0,01 —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —
0,300	B	0,02	1,82	14,06	16,50	12,58	7,75	4,32	2,31	1,22	0,64	0,34	0,18	0,09	0,05
0,300	é.c.	0,64 0,57 —	4,57 4,50 —	11,25 11,88 11,89	— 15,40 —	— 9,33 —	— 5,55 —	— 3,28 —	— 1,80 —	— 0,95* —	— 0,50* —	— 0,26* —	— 0,14* —	— 0,07* —	— 0,04* —
0,400	B	0,02	0,78	9,27	13,42	12,84	10,13	7,20	4,84	3,18	2,06	1,32	0,85	0,55	0,35
0,400	é.c.	0,56 0,54 —	3,27 3,21 —	8,79 8,77 —	— 13,78 —	— 11,10 11,14	— 8,07 —	— 5,67 —	— 3,88 —	— 2,50* —	— 1,61* —	— 1,04* —	— 0,67* —	— 0,43* —	— 0,28* —

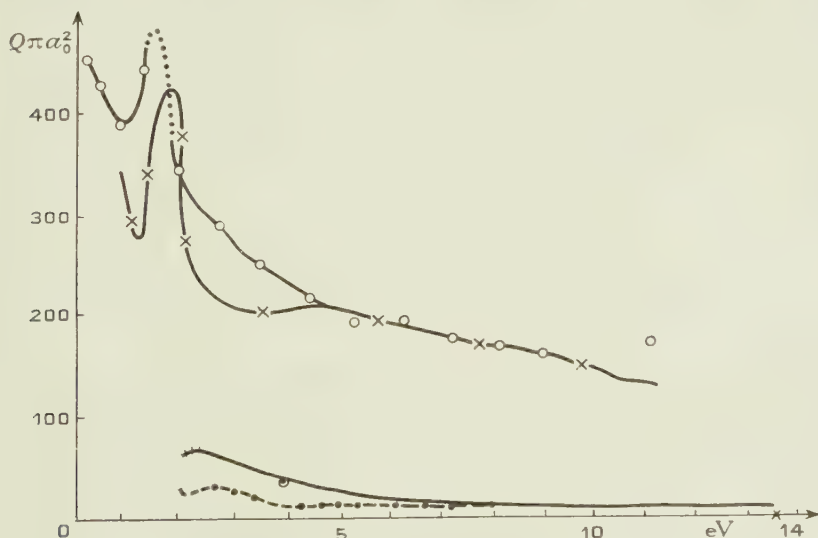


FIG. 5. — Sections élastiques et totales : ——— équations couplées (él.), — — — — Born II (él.), × expérience (Brode, tot.), ○ expérience (New York Univ., tot.).

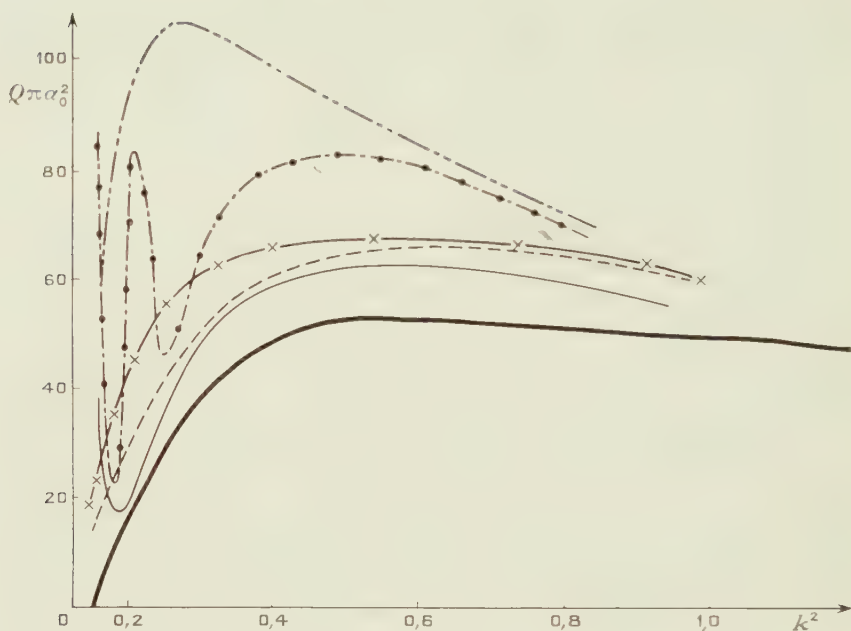


FIG. 6. — Sections inélastiques : ——— courbe expérimentale, ——— ondes déformées I (1), — · — · — Born I, — · — · — ondes déformées II, × Born II, — · — · — équations couplées. En abscisse, k^2 en unité de Hartree.

élastique déduite des expériences de Brode et de Haft. Il est très probable que l'échange, qui a été négligé, devrait relever ce maximum.

Les sections inélastiques obtenues en résolvant les équations couplées se situent entre l'approximation de Born et la courbe expérimentale. Nous n'avons pas trouvé de maximum initial comme dans [25] et dans [26].

On peut remarquer que les sections inélastiques calculées, aussi bien par la méthode de Born que par la résolution des équations couplées, sont nettement meilleures que les sections élastiques.

Il est probable qu'il faille en chercher la raison dans le fait qu'au seuil les sections inélastiques partielles sont nulles : $Q_{\text{inel}}^{L^T}(k_0) = 0$, k_0 designant l'énergie correspondant au seuil, pour toute valeur de L^T .

En effet, si k est voisin de k_0 ($k \rightarrow k_0$) on aura, quel que soit L^T , $Q_{\text{inel}}^{L^T}(k)$ petit et, par suite, même si les contributions correspondant aux valeurs de $L^T = 0, 1, 2$ (pour lesquelles l'échange n'est certainement pas négligeable) sont évaluées très incorrectement, la somme $Q_{\text{inel}} = \sum_{L^T=0} Q_{\text{inel}}^{L^T}$ peut être approchée d'une façon satisfaisante si elle porte sur un nombre suffisamment grand de termes.

(1) L'indice I signifie que les conditions de conservation ne sont pas respectées, l'indice II que ces conditions sont respectées.

Remarquons encore que la résolution des équations couplées n'apporte pas d'amélioration notable par rapport à l'approximation de Born (tableau III).

TABLEAU III

Sections élastiques					Sections inélastiques ⁽³⁾		
k_{3s}^2	L^T ⁽²⁾	$Q_{él}^{é.c.}$	L^T ⁽²⁾	$Q_{él}^B$	k_{3s}^2	$Q_{inél}^{é.c.}$	$Q_{inél}^B$
0,150 0	3	60,8	∞	26,63	0,150 0	14,03	18,29
0,160 8	5	65,7	∞	25,74	0,160 8	17,78	25,37
0,179 3	7	64,4	∞	26,22	0,179 3	21,24	35,32
0,300 0	7	42,4	∞	18,61	0,300 0	54,27	61,68
0,400 0	7	29,1	∞	25,96	0,400 0	62,12	66,91
0,600 0	10	19,31	∞	20,13	0,600 0	64,32	66,49
1,000 0	10	11,58	∞	13,47	1,000 0	57,36	58,74

Appendice 1. — Méthodes de calculs numériques utilisées

Nous avons fait tous les calculs du chapitre II sur une machine à calculer de bureau. Nous avons alors utilisé les fonctions radiales données numériquement dans [15] et dans [14] pour P_{3p} .

Pour le chapitre III, nous avons programmé les équations sur une I. B. M. 650-standard. La capacité de la machine étant très réduite, nous avons déterminé des expressions analytiques approchant de près les fonctions atomiques.

Les fonctions choisies sont de la forme générale

$$P_{nl} = \sum_{k=1}^3 \sum_{m=1}^3 A_{km}^{nl} r^{l+k} \exp(-B_{km}^{nl} r).$$

Les fonctions P_{1s} , P_{2s} , P_{2p} ont été prises dans [22] et, suivant la même méthode, on a déterminé les coefficients de P_{3s} (d'après la fonction calculée par Hartree) et de P_{3p} (d'après la fonction calculée par Fock). Les fonctions P_{3s} et P_{3p} ainsi déterminées approchent de très près les fonctions P_{3s} , P_{3p} des tables (l'écart est inférieur à 5 % sur tout l'intervalle de tabulation).

On a explicitement pour P_{3s} :

A				B			
m =	1	2	3	m =	1	2	3
k = 1	3,776	— 1,421	0	k = 1	+ 7,149	+ 1,750	0
2	3,474 3	0	0	2	0,971 5	0	0
3	0,091 02	0	0	3	0,714 4	0	0

et pour P_{3p} :

A				B			
m =	1	2	3	m =	1	2	3
k = 1	0	0	0	k = 1	0	0	0
2	— 2,153	— 1,382	0	2	6,877	2,958	0
3	0,051 0	0,050 1	0	3	0,559 5	1,035	0

⁽²⁾ Nombre de termes de section partielle.

⁽³⁾ 8 termes ont été effectivement calculés (de $L^T = 0$ à $L^T = 7$) dans $Q_{inél}^{é.c.}$, mais on a évalué le reste de la somme.

La méthode de résolution numérique choisie pour le chapitre II et pour la mise du problème sur la 650 a été la méthode de Gauss-Jackson [11, 23] dont nous donnons un bref résumé

Soit l'équation $y'' = f(x, y)$ et supposons que l'intervalle (a, b) dans lequel on cherche des solutions ait été divisé en intervalles réguliers h de sorte que $x_1 = a + i h$ ($x_0 = a$, $x_n = b$) ; posons $f_1 = f[x_1, y(x_1)]$, $y_1 = y(x_1)$. On définit alors les différences premières, secondes, etc. par

$$\delta_{i+(1/2)} y = y_{i+1} - y_i, \quad \delta_i^2 y = \delta_{i+(1/2)} y - \delta_{i-(1/2)} y, \quad \dots$$

On peut alors montrer que l'on a

$$\delta_i^2 y = h^2 \left(y'' + \frac{1}{12} \delta_i^2 y'' - \frac{1}{240} \delta_i^4 y + \dots \right),$$

soit

$$(44) \quad \delta^2 y_1 = h^2 \left(f_1 + \frac{1}{12} \delta_i^2 f \right) + O(h^6).$$

Si l'équation différentielle est linéaire on obtient immédiatement f_{i-1} à partir de f_i , f_{i-1} , y_i , y_{i-1} , f_{i+1} .

Cas d'équations couplées. — Supposons, pour simplifier, que l'on ait $y'' = f(x) y + g(x) z$, $z'' = h(x) y + k(x) z$ et l'utilisation de (44) pour chacune des deux équations conduit, en explicitant $\delta_i^2 f$ dans (44), à un système d'équations algébriques linéaires pour déterminer y_{i-1} , z_{i-1} . Cela se généralise à un système quelconque de fonctions.

Nous avons eu, ultérieurement, la possibilité d'utiliser une 650 à virgule fixe incorporée et à registre d'index, puis enfin une 704 I. B. M. sur laquelle nous avons écrit le programme et conservé les expressions analytiques pour les fonctions radiales, bien que la capacité de cette machine ait permis de faire entrer plusieurs tables de nombres. Nous avons sur la 704 changé de méthode d'intégration et nous avons utilisé la méthode de Runge-Kutta du 41^{me} ordre classique [24].

Si $y'^k = f^k(x, y', \dots, y^n)$, $k = 1, 2, \dots, n$ (n équations couplées du premier ordre), on a

$$y_{i+1}^k = y_i^k + (1/6) (\Lambda_1^k + 2 \Lambda_2^k + 2 \Lambda_3^k + \Lambda_4^k) + O(h^5),$$

avec

$$\Lambda_1^k = h f^k(x_i, y_i', \dots, y_i^n), \quad \Lambda_2^k = \frac{h}{3} f^k\left(x_i + \frac{h}{2}, \dots, y_i^m + \frac{\Lambda_1^m}{2}, \dots\right),$$

$$\Lambda_3^k = \frac{h}{3} f^k\left(x_i + \frac{h}{2}, \dots, y_i^m + \frac{\Lambda_2^m}{2}, \dots\right), \quad \Lambda_4^k = h f^k\left(x_i + h, \dots, y_i^m + \Lambda_3^m, \dots\right)$$

(on peut remarquer que si les f^k ne dépendent que de x on retrouve la méthode d'intégration de Simpson).

Nous avons refait sur 704 des calculs faits sur 650 et nous avons pu constater qu'il y avait en moyenne un écart entre les deux méthodes de l'ordre de 1 à 5 % sur les sections de choc.

Appendice 2. — Détermination des matrices A et B

Nos équations sont de la forme

$$(45) \quad \frac{d^2}{dr^2} F_l(r) + k_l^2 F_l(r) - \sum_{l'=1}^4 A_{ll'}(r) F_{l'}(r) = (\Phi \vec{F})_l = 0 \quad (l = 1, 2, 3, 4),$$

avec $A_{11'}(0) = 0$, $A_{11'}(r) = (M_{11'}/r^2) + (P_{11'}/r^3)$ dès que $r \geq r_0$ (M et P étant deux matrices symétriques) avec, en outre, $E = \frac{1}{2} k_1^2 + E_1$, $k_1^2 > 0$. Cette équation peut s'écrire, sous forme intégrale,

$$(46) \quad F_1(r) = \alpha_{11}^{(0)} \exp(\mathbf{i} k_1 r) + \beta_{11}^{(0)} \exp(-\mathbf{i} k_1 r) - \\ - \frac{1}{k_1} \sum_{l'=1}^4 \int_r^\infty \sin k_1(r - \xi) A_{11'}(\xi) F_{1'}(\xi) d\xi.$$

Que les k_1 soient distincts ou non, on peut chercher à déterminer un développement de la forme

$$(47) \quad F_1^N = \sum_{n=0}^N \sum_{l'} \alpha_{11'}^{(n)} \frac{\exp(\mathbf{i} k_{1'} r)}{r^n} + \beta_{11'}^{(n)} \frac{\exp(-\mathbf{i} k_{1'} r)}{r^n}$$

de façon que l'on ait $(\Phi \vec{F}^N)_1$ de l'ordre le plus élevé possible en $1/r^n$; on trouve alors

$$(48) \quad (\Phi \vec{F}^N)_1 = \vec{c}_1^N(r) = \sum_{l'} [k^2, \alpha^{(0)}] \exp(\mathbf{i} k_1 r) + [k^2, \alpha^{(1)}]_{11'} \frac{\exp(\mathbf{i} k_{1'} r)}{r} + \\ + \{ [k^2, \alpha^{(2)}]_{11'} - 2\mathbf{i} (\alpha^{(1)} k)_{11'} - (M \alpha^{(0)})_{11'} \} \frac{\exp(\mathbf{i} k_{1'} r)}{r^2} + \sum_{n=1}^N \{ [k^2, \alpha^{(n+2)}] - \\ - 2\mathbf{i} (n+1) \alpha^{(n+1)} k + [n(n+1) - M] \alpha^{(n)} - P \alpha^{(n-1)} \}_{11'} \frac{\exp(\mathbf{i} k_{1'} r)}{r^{n+2}} +$$

+ une expression analogue avec β , $[A, B] = AB - BA$.

Par suite, si on choisit par récurrence les $\alpha^{(n)}$ et $\beta^{(n)}$ de façon que les coefficients des exponentielles $\exp(\mathbf{i} k_{1'} r)/r^{n+2}$ soient nuls ($n = 0, 1, 2, \dots, N$), on pourra borner $\vec{c}_1^N(r)$ par η/r^{N+1} , η ne dépendant que des éléments de M, P, k^2 et de N .

Posant alors $F_1 - F_1^N = R_1^N$ on voit que $(\Phi \vec{R}_1^N) = -\vec{c}_1^N$ et que, par suite, $R_1^N = -\frac{1}{k_1} \sum_{l'} \int_r^\infty \sin(k_1 r - \xi) A_{11'}(\xi) R_{1'}^N(\xi) d\xi + \frac{1}{k_1} \int_r^\infty \sin(k_1 r - \xi) \vec{c}_1^N(\xi) d\xi$. Posant alors $S_N(r) = \sup_{1, r \in (r, \infty)} |R_1^N(r)|$ et bornant $|A_{11'}(r)|$ par Δ/r^2 , on voit que

$$|R_1^N(r)| \leq S_N(r) \leq \frac{\eta}{k_m N r^N} \frac{1}{1 - [8 \Delta / (k_m r)^2]},$$

où $k_m = \text{Log } f_1 k_1$; par suite (47), si les coefficients de (48) sont nuls, constitue bien un développement asymptotique. On peut ajouter les phases $-1/\pi/2$ dans les exponentielles ou prendre au lieu d'exponentielles des sinus et cosinus.

On peut alors prendre huit développements asymptotiques arbitraires de la forme

$$\Phi_i^{(Sp)} = \sum_{n,j} \alpha_{ij}^{(n)} \frac{\sin(k_1 r - \frac{1}{2} l_1 \pi)}{r^n} + \beta_{ij}^{(n)} \frac{\sin(k_1 r - \frac{1}{2} l_j \pi)}{r^n}$$

avec, par exemple,

$$S_1 = \left\{ \alpha^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \beta^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right\},$$

$$S_2 = \left\{ \alpha^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \beta^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right\}, \dots$$

$$S_8 = \left\{ \alpha^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \beta^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right\}.$$

Par suite, si on a un système de solutions dont le comportement asymptotique est $F_{ij} \sim \sin(k_i r - \frac{1}{2} l_i \pi) A_{ij} + \cos(k_i r - \frac{1}{2} l_i \pi) B_{ij} + \dots$, les coefficients A_{ij} et B_{ij} pourront être déterminés, si on connaît $F_{ij}(r_1)$, $F'_{ij}(r_1)$, en écrivant

$$(49) \quad F_{ij}(r_1) = A_{1j} \Phi_1^{(S_1)}(r_1) + A_{2j} \Phi_1^{(S_2)}(r_1) + A_{3j} \Phi_1^{(S_3)}(r_1) + \\ + A_{4j} \Phi_1^{(S_4)}(r_1) + B_{8j} \Phi_1^{(S_5)}(r_1) + \dots + B_{4j} \Phi_1^{(S_8)}(r_1)$$

et des relations analogues pour les dérivées.

On est donc amené à résoudre un système d'équations linéaires. Si r_1 est suffisamment grand les matrices A et B ne dépendront pas de r (nous avons calculé A et B pour $r_1 = 40 a_0$ et $50 a_0$; les sections de choc sont exactement les mêmes).

Le nombre N de termes à prendre dans (47) est déterminé par la condition $\eta(M, P, k^2, N)/k_m N r_1^N$ minimum pour r_1 donné.

Si on ne connaît pas les dérivées premières, on écrit (49) pour deux valeurs de r voisines.

Appendice 3. — Approximation de Born II

Considérons l'équation avec second membre

$$(50) \quad DF(r) = \varphi(r), \quad \text{où } D = \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1(1+1)}{r^2} + k^2.$$

Les solutions indépendantes de l'équation sans second membre étant

$$j_1(kr) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{2} J_{1+(1/2)}(kr) \sim k^{-1/2} \sin(kr - \frac{1}{2} l \pi),$$

$$y_1(kr) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{2} (-1)^l J_{-1-(1/2)}(kr) \sim k^{-1/2} \cos(kr - \frac{1}{2} l \pi),$$

la solution générale de (50), régulière à l'origine, sera

$$(51) \quad F(r) = A j_1(kr) + j_1(kr) \int_r^\infty y_1(kr_1) \varphi(r_1) dr_1 - \\ - y_1(kr) \int_0^r j_1(kr_1) \varphi(r_1) dr_1.$$

Soit maintenant le système d'équations couplées (pas de termes intégraux)

$$(52) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1_i + 1}{r^2} + k_i^2 \right] F_i(r) = \sum_{k=1}^n V_{ik} F_k \quad (i = 1, \dots, n).$$

Si on considère l'un quelconque des n systèmes de solutions indépendantes de (52) ayant pour conditions aux limites

$$F_{ij}(0) = 0, \quad F_{ij} \sim k_j^{-1/2} [\delta_{ij} \sin(k_i r - \frac{1}{2} l_i \pi) + \cos(k_i r - \frac{1}{2} l_i \pi) R_{ij}],$$

on obtient, en transformant (52) en équation intégrale,

$$(53) \quad F_{ij} = j_{1i}(k_1 r) \delta_{ij} + j_{1i}(k_1 r) \int_r^\infty y_{1i}(k_1 r_1) \sum_k v_{ik}(r_1) F_{kj}(r_1) dr_1 - \\ - y_{1i}(k_1 r) \int_0^r j_{1i}(k_1 r_1) \sum_k v_{ik}(r_1) F_{kj}(r_1) dr_1.$$

La matrice R_{ij} est alors

$$(54) \quad R_{ij} = - \int_0^\infty j_{1i}(k_1 r_1) \sum_k v_{ik}(r_1) F_{kj}(r_1) dr_1.$$

L'approximation de Born consiste à prendre pour F les ondes planes $F_{kj} = j_{1k}(k_k r) \delta_{kj}$ et, par suite,

$$(55) \quad R_{ij}^B = - \int_0^\infty j_{1i}(k_1 r_1) v_{ij}(r_1) j_{1j}(k_j r_1) dr_1.$$

Dans l'approximation II de Born, on prend pour la matrice S la forme exacte $S^B = (1 + iR^B)(1 - iR^B)$. Dans l'approximation I de Born, on prend $S = 1 - 2iR^B$ car on suppose R^B petit (voir particulièrement [6, 27, et 28]).

Pour le sodium comme pour l'hydrogène, $v_{11} = 0$ pour $r > r_0$, $v_{ij} \sim \alpha_{ij}/r^{\lambda+1}$ pour $r > r_0$ et on peut écrire en particulier, pour les termes non diagonaux,

$$R_{1_1 1_2}^B = - \frac{\pi}{2} \int_0^{r_0} J_{1_1+(1/2)}(k_1 r) v_{12}(r) J_{1_2+(1/2)}(k_2 r) r dr + \\ + \frac{\pi}{2} \alpha_{12} \int_0^{r_0} J_{1_1+(1/2)}(k_1 r) \frac{1}{r^\lambda} J_{1_2+(1/2)}(k_2 r) dr - \\ - \frac{\pi}{2} \alpha_{12} \int_0^\infty J_{1_1+(1/2)}(k_1 r) \frac{1}{r^\lambda} J_{1_2+(1/2)}(k_2 r) dr.$$

Considérons les éléments donnant les sections inélastiques. On sait que

$$(\alpha) \quad Q^{L^T}(3s \rightarrow 3p) = \frac{2L^T + 1}{k_s^2} \left[|T_{k_s, L^T+1}^{L^T}|^2 + |T_{k_s, L^T-1}^{L^T}|^2 \right];$$

or $T^{L^T} = -2iR^{L^T}/(1 - iR^{L^T}) \simeq -2iR^{L^T}$, si R^{L^T} est petit. Cela est certainement le cas pour les grandes valeurs de L^T . En outre si $k_p \ll 1$ et $k_s = k_s^0$ $[= (0,442)^{1/2} < 1$ pour le sodium] et si $k_s < 1$ les deux premières intégrales sont égales, de signes opposés et tendent vers 0. Par suite, on aura (approximation de Bethe)

$$(56) \quad R_{1_1 1_2}^{L^T} = - \frac{\pi}{2} S_{12} \int_0^\infty J_{1_1+(1/2)}(k_1 r) \frac{1}{r^\lambda} J_{1_2+(1/2)}(k_2 r) dr.$$

Cette intégrale est calculée dans [29] et [30].

Si $k_1 \neq k_2$, on a

$$R_{1_1 1_2}^{L^T} = - \frac{\pi}{2} S_{12} \left(\frac{k_<}{k_>} \right)^{1_<+(1/2)} \frac{1}{2^{1_>-1_<}} \frac{\Gamma[\frac{1}{2}(1_> - 1_<) - \frac{1}{2}\lambda + 1]}{\Gamma[1_< - (3/2)] \Gamma[\frac{1}{2}(1_> - 1_<) + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\lambda]} \lambda F^{21} \\ (57) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{ou } F_{21} = F_{21} \left[\frac{1}{2}(1_> + 1_<) - \frac{\lambda}{2} - 1, \frac{1}{2}(1_< - 1_>) - \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{2}, 1 + \frac{3}{2}, \left(\frac{k_<}{k_>} \right)^2 \right], \\ F_{21}(a, b, c, x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{b}{41} \frac{x}{41} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{b(b+1)}{21} \frac{x^2}{21} + \dots, \\ k_> = \text{Sup}(k_1, k_2), \quad 1_> = \text{Sup}(1_1, 1_2), \quad k_< = \text{Inf}(k_1, k_2), \quad 1_< = \text{Inf}(1_1, 1_2). \end{array} \right.$$

Si $k_1 = k_2 = k$,

$$(58) \quad R_{l_1 l_2}^{L^T} =$$

$$= \frac{(k/2)^{\lambda-1} \Gamma(\lambda) \Gamma[\frac{1}{2}(l_1 + l_2) - \frac{1}{2}\lambda + 1]}{2 \Gamma[\frac{1}{2}(l_1 - l_2) + \frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{2}] \Gamma[\frac{1}{2}(l_2 - l_1) + \frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{2}] \Gamma[\frac{1}{2}\lambda + 1 + \frac{1}{2}(l_1 + l_2)]}.$$

Nous avons explicitement à calculer :

$$a) R_{k_s k_p}^{L^T, L^{T+1}}(\lambda = 1); \quad b) R_{k_s k_p}^{L^T, L^{T-1}}(\lambda = 1); \quad c) R_{k_p k_p}^{L^T, L^{T+1}}(\lambda = 2).$$

Supposons $L^T > L_0$, L_0 grand. Pour $a)$ et $b)$, $l_> - l_< = 1$, $l_> + l_< = 2 L^T \pm 1$, de sorte que les coefficients avec les fonctions T ne varieront pas en passant de R^{L^T} à R^{L^T+1} . F ne variera pas non plus en passant de L^T à $L^T + 1$ et si k_p est suffisamment petit, on aura même $F \simeq 1$. Par suite, pour $a)$ et $b)$

$$R_{l_1 l_2}^{L^T} \simeq A (k_p/k_s)^{L^T + (1/2) + \varepsilon}$$

d'après (57) où $\varepsilon = 0$ pour $a)$ et -1 pour $b)$. A est une constante indépendante de l'énergie et de L^T . Ces relations figurent dans [7].

Pour $c)$, d'après (58), $R_{L^T-1, L^T+1}^{L^T} \simeq k B$, où B est indépendant de l'énergie et de L^T mais $c)$ n'intervient pas dans la section inélastique ($3s \rightarrow 3p$). D'après (α) on aura alors

$$Q_{\text{inéel}}^{L^T} = 4 \frac{2 L^T - 1}{k_s^2} A^2 \left(\frac{k_p}{k_s} \right)^{2L^T} \left[A \left(\frac{k_p}{k_s} \right) + A' \left(\frac{k_p}{k_s} \right) \right],$$

c'est-à-dire

$$(59) \quad Q_{\text{inéel}}^{L^T+1} / Q_{\text{inéel}}^{L^T} \simeq (k_p/k_s)^2.$$

La formule (59), exprimant une relation en énergie, ne dépend pas de l'approximation et, par suite, elle est encore valable pour les calculs faits en résolvant les équations couplées; c'est ce que l'on vérifie d'ailleurs pour le sodium où (59) est vérifiée pour les sections inélastiques de Born et des équations couplées.

RÉFÉRENCES

- [1] I. C. PERCIVAL & M. J. SEATON, The partial wave theory of electron-hydrogen atom collisions, *Proc. Cambridge phil. Soc.*, t. **53**, 1957, p. 654.
- [2] M. J. SEATON & I. C. PERCIVAL, Méthodes modernes dans la théorie quantique des collisions, Séminaire de T. Kahan sur la mécanique quantique et la théorie des groupes, 1957-58.
- [3] M. J. SEATON, The Hartree-Fock equations for continuous states with applications to electron excitation of the ground configuration terms of O I, *Phil. Trans. [A]*, t. **245**, 1953, p. 469.
- [4] B. H. BRANDEN, A. DALGARNO, T. L. JOHN & M. J. SEATON, The elastic scattering of slow electrons by hydrogen atoms, *Proc. phys. Soc.*, t. **71**, 1958, p. 877.
- [5] A. FILIPPOV & W. PROKOPIEV, *Zeits. Physik*, t. **6**, 1934, p. 368.
- [6] M. J. SEATON, Strong coupling in optically allowed atomic transitions produced by electron impact, *Proc. phys. Soc.*, t. **77**, 1961, p. 174.
- [7] M. J. SEATON, Cross sections for $2s-2p$ transitions in H and for $3s-3p$ transitions in Na produced by electron and by proton impact, *Proc. phys. Soc. [A]*, t. **68**, 1955, p. 457.
- [8] A. SALMONA & M. J. SEATON, Electron collisions with Na atoms, *Proc. phys. Soc.*, t. **77**, 1961, p. 617.

- [9] G. HAFT, *Zeits. Physik*, t. **82**, 1933, p. 73.
- [10] H. E. SARAPH & M. J. SEATON, An iteration method for atomic scattering problems (non publié).
- [11] D. R. HARTREE, The calculation of atomic structures, éd. Chapman & Hall, London, 1957.
- [12] E. U. CONDON & G. H. SHORTLEY, The theory of atomic spectra, éd. Cambridge Univ. Press, 1935.
- [13] U. FANO & G. RACAH, Irreducible tensorial sets, éd. Acad. Press, New York, 1959.
- [14] FOCK & PETRASHEN, *Phys. Zeits. Sowjet.*, t. **6**, 1934, p. 368.
- [15] D. R. HARTREE & W. HARTREE, Self-consistent field, with exchange, for nitrogen and sodium, *Proc. Royal Soc. [A]*, t. **193**, 1948, p. 299.
- [16] N. F. MOTT & H. S. W. MASSEY, Theory of atomic collisions, 2^{me} éd., Oxford Univ. Press, 1949.
- [17] A. SALMONA & P. FRENKIEL, Calcul de la diffusion élastique sans polarisation et sans échange d'un électron de vitesse nulle par un atome neutre de sodium dans l'état fondamental, *Jl Phys.* [8], t. **20**, 1959, p. 492.
- [18] R. B. BRODE, Absorption coefficient for slow electrons in alkali metal vapours, *Phys. Review*, t. **34**, 1929, p. 673.
- [19] PEREL, ENGLANDER & BEDERSON, Measurement of total cross sections of the scattering of low energy electrons by lithium, sodium and potassium, New York Univ. (non publié).
- [20] L. T. JOHN, The numerical solution of the exchange equations for slow electron collisions with hydrogen atoms, *Proc. phys. Soc.*, t. **76**, 1960, p. 532.
- [21] H. G. DEHMELT, Spin resonance of free electrons polarized by exchange collisions, *Phys. Review*, t. **109**, 1958, p. 381.
- [22] P.-O. LÖWDIN, Studies of atomic self-consistent fields. I. Calculation of Slater functions, *Phys. Review*, t. **90**, 1953, p. 120.
- [23] D. R. HARTREE, Numerical methods analysis, Oxford Univ. Press, 1961.
- [24] LANCE, Numerical methods for high speed computers, éd. Iliffe and Sons, London, 1962.
- [25] VAINSTEIN, Institut Lebedev, Moscou, rapport A-33, 1960.
- [26] W. B. SOMMERVILLE, The importance of conservation conditions in distorted wave calculations, *Proc. phys. Soc.*, t. **78**, 1961, p. 695.
- [27] M. J. SEATON, The evaluation of partial wave integrals in the Born approximation, *Proc. phys. Soc.*, t. **77**, 1961, p. 184.
- [28] J. LAWSON, W. LAWSON & M. J. SEATON, The calculation of Born partial wave integrals for some transitions in H produced by electron impact, *Proc. phys. Soc.*, t. **77**, 1961, p. 192.
- [29] G. N. WATSON, Bessel functions, Cambridge Univ. Press, 1958.
- [30] ERDELYI, MAGNUS, OBERHETTINGER & TRICOMI, Bateman manuscript project, éd. McGraw-Hill, New York, 1953.
- [31] M. J. SEATON, non publié.



DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté :

**« Application de la théorie des groupes aux
vibrations des systèmes de particules »**

Vu et approuvé :

Paris, le 16 Mai 1963

Le Doyen de la Faculté des Sciences,

Marc ZAMANSKY

Vu et Permis d'imprimer :

Le Recteur de l'Académie de Paris,

Jean ROCHE

FRIEDEL	T	Physique des Solides. (Orsay).	CABANNES	T	Mécanique générale.
M. JULIA	T	Etudes des Moléculaires naturelles complexes.	LESIEUR	T	Mathématiques I (Orsay).
LENDER	T	Biologie Anim. S. P. C. N. Orsay.	MAZET	T	Mécanique générale (Orsay).
MAGAT	T	Physico-Chimie des radio-éléments.	CAIRE		Géographie phys. et Géolog. Dynamique.
Mlle QUINTIN	T	Electrochimie.	COMOLET	T	Mécanique des fluides.
MONOD	T	Chimie du métabolisme.	CORABOEUF		Physiologie animale Orsay.
BENOIT	T	Physiol. anim. (Orsay).	DELLOUE		Physique de l'exosphère.
DE POSSEL	T	Analyse numérique.	GORENFLOT		Botanique II (Orsay)
CHARLOT	T	Chimie analytique.	HOULLON		Biologie animale P. C. B.
LEMÉE	T	Physiol. Vég. B. M. P. V. (Orsay).	JULLIEN J.		Chimie S. P. C. N. (Orsay).
GUERIN	T	Chimie M. P. C. (Orsay).	MALGRANGE	T	Technique Math. de la Physique (Orsay).
CHATELET M.	T	Chimie P. C. B.	OLIVIER		Antropologie.
JEAN	T	Physique Nucléaire Orsay.	NOZERAN	T	Botanique II (Orsay).
MATTLER	T	Physique S. P. C. N.	BLANC-LAPIERRE ..	T	Physique ENS (Orsay).
BERGERARD	T	Zoologie (Orsay).	CHEVAUGEON	T	Botanique (Orsay).
BERTEIN	T	Electronique (Orsay).	KAHANE	T	Mathématiques (Orsay).
BOUSSIÈRES		Chimie des radioéléments. (Orsay).	SAMUEL	T	Mathémat. E. N. S. féminines.
M ^{me} COUTURE	T	Thermodynamique et Méc. Physique.	KOURGANOFF	T	Astronomie (Orsay).
ELLENBERGER	T	Géologie des grandes régions du globe.	THIRY	T	Mécanique céleste.
FRANC	T	Biologie animale P. C. B.	ABELES		Physique S. P. C. N.
SCHNELL		Botanique tropicale (Orsay).	AMAT		Physique P. C. B.
STOLKOWSKI	T	Physiologie végétale.	AUBOIN		Géologie.
ACHER		Chimie Biol. (Orsay).	M ^{me} BENOIT-GUEU-		Physique Nucl. et radioactivité.
BAUDOIN		Biologie animale P. C. B.	TAL		Biologie marine (Villefranche/mer).
BEAUMONT		Biologie animale S. P. C. N.	BOUGIS		
BLAMONT	T	Géophysique ionosphère	BRUHAT	T	Mathématiques M. P. C.
BOURREAU		Botanique.	BRUNN	T	Géologie historique (Orsay).
CURIE D.		Physique M. G. P.	CHABBAL		Physique M. G. P. (Orsay).
DURAND-DELGA. ..	T	Géologie.	DEHEUVELS	T	Mathématique Propé (Orsay).
FREON	T	Chimie organique (Orsay).	D'ESPAGNAT		Physique théorique (Orsay).
HELLER	T	Physiolog. végétale.	FURON		Géologie S. P. C. N.
TORTRAT	T	Calcul des Probabilités.	M ^{me} GANS	T	Génétique.
CAILLEUX		Géologie (S. P. C. N.).	GENEVES		Biologie végétale P. C. B.
MAGNAN	T	Physique S. P. C. N.	GUILBERT		Physique (C. U. S. Orléans).
DAUDEL	T	Mécanique ondulatoire appliq. à la chimie Théorique et à la Phys. Nucléaire.	HUPE		Pétrographie.
Mlle FOURCROY ...		Biologie Végétale S. P. C. N.	HOLLANDE	T	Biologie générale.
M ^{me} CHOQUET-BRU-	T	Mécan. Analytique et méca. céleste.	LIONS	T	Analyse numérique.
HAT			MAITTE		Chimie P. C. B.
Mlle VEIL		Physiologie Générale.	MEYER		Physique propédeutique.
LWOFF	T	Microbiologie.	NICOLAS		Géologie appliquée.
SESTRUNCK	T	Mécan. Phys. et Expérim.	PANIGEL		Biologie générale.
LACOMBE	T	Métallurg. des métaux Nucléaires.	RAVIER		Pétrographie.
BROCHARD	T	Physique P. C. B. (Orsay).	ROSEAU	T	Mécanique théor. des fluides.
			ROUBINE		Electronique.
			SILBERT	T	Chimie P. C. B.
			UEBERSFELD	T	Electronique.
			YVON	T	Théories Physiques.

Le Secrétaire Général..... R. POULLAIN.

